



# Analyses multi-échelles du comportement en fluage d'alliages de zirconium

Mathieu Priser

## ► To cite this version:

Mathieu Priser. Analyses multi-échelles du comportement en fluage d'alliages de zirconium. Mécanique des matériaux [physics.class-ph]. Université de Bretagne Sud, 2011. Français. NNT: . tel-00642008v2

**HAL Id: tel-00642008**

**<https://theses.hal.science/tel-00642008v2>**

Submitted on 18 Nov 2011

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



THÈSE / UNIVERSITÉ DE BRETAGNE-SUD

UFR Sciences et Sciences de l'Ingénieur  
*sous le sceau de l'Université Européenne de Bretagne*

Pour obtenir le grade de :  
DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE BRETAGNE-SUD  
*Mention : Sciences pour l'Ingénieur  
Spécialité : Mécanique des Matériaux  
École Doctorale : SICMA*

présentée par

**Mathieu Priser**

Laboratoire d'Ingénierie des Matériaux de Bretagne  
Equipe Comportement des Matériaux Hétérogènes

# Analyses multi-échelles du comportement en fluage d'alliages de zirconium

Thèse soutenue le 17 mars 2011,  
devant la commission d'examen composée de :

**Pr. Bréchet Yves**  
SIMAP, Grenoble / Rapporteur

**Pr. Cailletaud Georges**  
Centre des Matériaux, Evry / Rapporteur

**Dr. Bacroix Brigitte (DR CNRS)**  
LPMTH, Villetaneuse / Examineur

**Pr. Feaugas Xavier**  
LEMMA, La Rochelle / Examineur

**Dr. Leclercq Sylvain (HDR)**  
EDF R&D, Moret-sur-Loing / Invité

**Dr. Onimus Fabien**  
CEA/SRMA, Saclay / Invité

**Dr. Cloué Jean-Marc (HDR)**  
AREVA NP, Lyon / Maître de thèse

**Pr. Pilvin Philippe**  
LIMATB, Lorient / Directeur de thèse

**Pr. Poquillon Dominique**  
CIRIMAT, Toulouse / Co-directrice de thèse



---

# Remerciements

---

Je tiens à remercier en tout premier lieu Philippe PILVIN qui a dirigé cette thèse dans la continuité de mon stage de fin d'étude d'une main de maître. Tout au long de ces trois années, il a su orienter mes recherches aux bons moments en me faisant découvrir la mécanique des matériaux au travers de son regard de mécanicien et de modélisateur. Pour tout cela, sa confiance et son soutien à toute épreuve notamment en fin de thèse, je le remercie vivement.

J'associe bien sûr à ces remerciements mes co-encadrants qui ont joué un rôle fondamental dans la réussite de ce projet de recherche. Merci à Jean-Marc CLOUÉ pour m'avoir inculqué une approche pragmatique de la métallurgie des alliages de zirconium et plus généralement à la société AREVA pour m'avoir fait confiance en finançant cette étude. Merci également à Dominique POQUILLON pour les nombreux échanges partagés au cours de ces travaux notamment sur l'analyse expérimentale des essais de fluage. J'aimerais également remercier Xavier FEAUGAS pour les nombreuses discussions sur la métallurgie physique des polycristaux hexagonaux ainsi que pour l'escapade chinoise lors du congrès ASTM.

Je remercie les rapporteurs de cette thèse Yves BRECHET et Georges CAILLETAUD pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail aussi bien au travers de leurs très pertinentes remarques écrites que lors de la séance de questions après la soutenance. Merci également aux autres membres du jury qui ont accepté de juger ce travail malgré leurs emplois du temps très chargés : Brigitte BACROIX, Fabien ONIMUS et Sylvain LECLERCQ.

Je voudrais également remercier les différentes personnes de l'équipe thermique du LIMATB, Jean COSTA, Muriel CARIN et Denis CARRON qui ont contribué à la mise en place des essais et avec qui j'ai eu le plaisir d'avoir des échanges très intéressants, plus particulièrement autour de la modélisation couplée des problèmes thermoélectriques. Je souhaiterais par ailleurs remercier Kader NIANG pour avoir toujours répondu présent à nos demandes parfois exotiques !



La qualité et la continuité des données expérimentales présentées ici sont le fruit d'un travail d'équipe initié de longue date par l'équipe toulousaine, notamment à l'occasion du travail de thèse de Catherine GROSJEAN que je tiens à remercier par ces quelques lignes. Je remercie également son successeur, Martin RAUTENBERG, pour les échanges très positifs partagés au cours de ces travaux.

Une pensée nostalgique (déjà !) pour toutes les personnes avec qui j'ai partagé une salle, un nouvel an, une soirée, un café, un repas ou une console d'ordinateur pendant ces trois années : Reno, Anne-Gaelle, Nico, Ben, Arnaud, Tom, Yann, Jerem, Antonio, Jonathan, Cédric et toute la troupe du très convivial Laboratoire d'ingénierie des matériaux de Bretagne (EG2M et ECOMATH!).

Merci à Christophe et Maïwenn du temps qu'ils ont consacré à redonner un peu de rigueur à ma plume qui a tendance quelquefois à dérapier...

Enfin, je voudrais remercier mes familles pour m'avoir soutenu pendant ces trois années. Bien entendu, j'ai une pensée particulière pour toi Maïwenn qui m'a accompagné au jour le jour tout au long de ce projet. Ton soutien sans faille a été pour moi d'une importance capitale et c'est en grande partie grâce à toi que j'écris ces lignes aujourd'hui !

Saint-Herblain, le 20 octobre 2011.

*A mon père...*



---

# Table des matières

---

|  |           |
|--|-----------|
| <b>Nomenclature</b>  | <b>7</b>  |
| <b>Introduction</b>  | <b>9</b>  |
| <b>I Thermomécanique des alliages de zirconium</b>   | <b>15</b> |
| I.1 Introduction . . . . .   | 15        |
| I.2 Les alliages de zirconium . . . . .  | 15        |
| I.3 Evolution de la composition chimique des alliages de Zr . . . . .                              | 16        |
| I.4 Procédé de mise en forme . . . . .   | 17        |
| I.5 Texture cristallographique . . . . .   | 20        |
| I.5.1 Analyse expérimentale . . . . .  | 20        |
| I.5.2 Figures de pôles . . . . .   | 21        |
| I.5.3 Facteurs de Kearns . . . . .   | 21        |
| I.6 Mécanismes de déformation à chaud . . . . .  | 24        |
| I.6.1 Dislocations - Systèmes de glissement . . . . .  | 25        |
| I.6.2 Mécanismes thermiquement activés . . . . .   | 27        |
| I.6.2.1 Vieillissement dynamique . . . . .   | 27        |
| I.6.2.2 Glissement dévié des dislocations . . . . .  | 29        |
| I.6.2.3 Montée des dislocations . . . . .  | 29        |
| I.7 Changement d'échelle dans les polycristaux . . . . .   | 31        |
| I.8 Démarche de l'étude . . . . .  | 34        |
| <b>II Caractérisation expérimentale du comportement viscoplastique du Zircaloy-4 recristallisé</b> | <b>37</b> |
| II.1 Introduction . . . . .  | 37        |
| II.2 Présentation du produit étudié . . . . .  | 38        |
| II.3 Comportement en fluage biaxial . . . . .  | 38        |
| II.3.1 Dispositif expérimental . . . . .   | 39        |
| II.3.2 Données expérimentales . . . . .  | 40        |
| II.3.2.1 Stationnarité de l'écoulement viscoplastique en stade II                                  | 40        |
| II.3.2.2 Surfaces isovitesse . . . . .   | 41        |

---

|            |   |           |
|------------|---|-----------|
| II.3.3     | Mécanismes de déformation . . . . .   | 43        |
| II.3.4     | Facteurs de Schmid en traction uniaxiale . . . . .                                    | 45        |
| II.3.5     | Facteurs de Schmid sous chargement multiaxial . . . . .                               | 45        |
| II.3.6     | Anisotropie viscoplastique . . . . .  | 48        |
| II.4       | Comportement en relaxation . . . . .  | 51        |
| II.4.1     | Dispositif expérimental . . . . .   | 51        |
| II.4.1.1   | Gradient et stabilité thermique . . . . .   | 52        |
| II.4.1.2   | Modélisation du problème thermoélectrique . . . . .                                   | 53        |
| II.4.1.3   | Oxydation des éprouvettes . . . . .   | 54        |
| II.4.2     | Analyses des résultats . . . . .  | 54        |
| II.4.2.1   | Protocole expérimental . . . . .  | 54        |
| II.4.2.2   | Comportement thermoélastique . . . . .  | 56        |
| II.4.2.3   | Limite d'élasticité . . . . .   | 57        |
| II.4.2.4   | Estimation des volumes d'activation . . . . .   | 58        |
| <b>III</b> | <b>Transition d'échelle dans les polycristaux hexagonaux</b>                          | <b>63</b> |
| III.1      | Introduction . . . . .  | 63        |
| III.2      | Description des calculs EF d'agrégats . . . . .                                       | 65        |
| III.2.1    | Maillages & géométrie . . . . .   | 65        |
| III.2.1.1  | Processus de Voronoï . . . . .  | 65        |
| III.2.1.2  | Caractérisation morphologique des géométries granulaires                              | 66        |
| III.2.1.3  | Analyse de la discrétisation EF . . . . .   | 68        |
| III.2.2    | Texture cristallographique . . . . .  | 70        |
| III.2.2.1  | Figures de pôles . . . . .  | 70        |
| III.2.2.2  | Micrographie "EBSD" . . . . .   | 72        |
| III.2.3    | Loi de comportement . . . . .   | 72        |
| III.2.4    | Chargement mécanique . . . . .  | 75        |
| III.3      | Estimation statistique du comportement moyen d'une phase . . . . .                    | 77        |
| III.3.1    | Approche auto-cohérente . . . . .   | 77        |
| III.3.2    | Description de l'estimateur . . . . .   | 77        |
| III.3.3    | Comportement asymptotique de l'estimateur en non-linéaire . . . . .                   | 79        |
| III.3.3.1  | Indicateurs de convergence . . . . .  | 79        |
| III.3.3.2  | Impact de la texture sur la convergence de l'estimateur                               | 81        |
| III.3.4    | Orientations cristallines des phases étudiées . . . . .                               | 83        |
| III.3.5    | Impact de la forme polyédrique des grains . . . . .                                   | 84        |
| III.3.5.1  | Modélisation d'une forme sphérique . . . . .  | 84        |
| III.3.5.2  | Nécessité d'un schéma itératif sur les formes . . . . .                               | 85        |
| III.4      | Vers une règle de changement d'échelles adaptée aux polycristaux hexagonaux . . . . . | 86        |
| III.4.1    | Description de la base d'essais numériques de référence . . . . .                     | 87        |
| III.4.2    | Effet de forme . . . . .  | 88        |
| III.4.3    | Confrontation des résultats aux modèles de la littérature . . . . .                   | 88        |
| III.4.4    | Estimation des paramètres ajustables . . . . .  | 94        |
| III.4.4.1  | Procédure d'identification . . . . .  | 94        |

---

|           |   |            |
|-----------|---|------------|
| III.4.4.2 | Identification du modèle en $\beta$ . . . . .                                   | 96         |
| III.4.5   | Une transition d'échelle anisotrope et diffuse ? . . . . .                      | 97         |
| III.4.5.1 | Anisotropie hexagonale . . . . .  | 98         |
| III.4.5.2 | Localisation diffuse . . . . .  | 98         |
| III.4.5.3 | Apport des modifications de la règle en $\beta$ . . . . .                       | 100        |
| <b>IV</b> | <b>Modélisations polycristalline et macroscopique du comportement en fluage</b> | <b>103</b> |
| IV.1      | Introduction . . . . .  | 103        |
| IV.2      | Modélisation polycristalline du comportement à 400°C . . . . .                  | 104        |
| IV.2.1    | Loi de comportement à l'échelle des grains . . . . .                            | 105        |
| IV.2.2    | Transition d'échelle VER $\rightarrow$ phases cristallographiques . . . . .     | 108        |
| IV.2.3    | Identification du modèle polycristallin à 400°C . . . . .                       | 109        |
| IV.2.3.1  | Modèle polycristallin avec la règle de Kröner . . . . .                         | 109        |
| IV.2.3.2  | Modèle polycristallin avec la règle en $\beta$ . . . . .                        | 110        |
| IV.2.4    | Comparaison essais-modèle . . . . .   | 112        |
| IV.2.5    | Surfaces isovitesse . . . . .   | 116        |
| IV.2.5.1  | Estimation dichotomique des surfaces isovitesse . . . . .                       | 116        |
| IV.2.5.2  | Simulation des surfaces isovitesse avec le modèle polycristallin . . . . .      | 116        |
| IV.2.6    | Impact du glissement dévié dans le modèle polycristallin . . . . .              | 116        |
| IV.2.7    | Analyse des résultats à l'échelle des grains . . . . .                          | 118        |
| IV.3      | Modélisation macroscopique du comportement EVP . . . . .                        | 125        |
| IV.3.1    | Surface de charge . . . . .   | 125        |
| IV.3.2    | Du polycristal à une modélisation phénoménologique . . . . .                    | 126        |
| IV.3.2.1  | Observations expérimentales . . . . .   | 126        |
| IV.3.2.2  | Vers une modélisation multi-surfaces . . . . .                                  | 126        |
| IV.3.3    | Critère d'écoulement mixte . . . . .  | 129        |
| IV.3.4    | Modélisation multimécanisme . . . . .   | 131        |
| IV.3.5    | Application au comportement EVP du Zy-4 à 20°C . . . . .                        | 133        |
| IV.3.5.1  | Données expérimentales . . . . .  | 133        |
| IV.3.5.2  | Identification du modèle à deux surfaces . . . . .                              | 134        |
| IV.3.5.3  | Comparaison essais-modèle . . . . .   | 135        |
| IV.3.6    | Application du modèle au fluage du Zy-4 à 400°C . . . . .                       | 137        |
| IV.3.6.1  | Identification du modèle . . . . .  | 137        |
| IV.3.6.2  | Simulation des essais de fluage . . . . .                                       | 138        |
| IV.3.6.3  | Surfaces isovitesse . . . . .   | 141        |
| <b>V</b>  | <b>Vers une modélisation micromécanique du fluage sous irradiation</b>          | <b>145</b> |
| V.1       | Effets de l'irradiation sur la microstructure . . . . .                         | 146        |
| V.1.1     | Cascade de déplacements . . . . .   | 146        |
| V.1.2     | Production des défauts ponctuels . . . . .                                      | 147        |
| V.1.2.1   | Recombinaison des défauts . . . . .   | 148        |
| V.1.3     | Evolutions microstructurales . . . . .  | 148        |

|  |   |            |
|--|---|------------|
| V.1.3.1  | Les boucles de dislocations . . . . .                                 | 149        |
| V.1.3.2  | Déplacement des équilibres thermodynamiques . . . . .                 | 151        |
| V.2  | Déformation sous irradiation : Mécanismes & interprétations . . . . . | 151        |
| V.2.1  | Puits de défauts ponctuels . . . . .                                  | 154        |
| V.2.2  | Différence de volume de relaxation . . . . .                          | 156        |
| V.2.3  | Différence d'Anisotropie de Diffusion (DAD) . . . . .                 | 156        |
| V.2.4  | Influence de la contrainte sur le biais d'un puits . . . . .          | 157        |
| V.2.4.1  | Cas des dislocations . . . . .  | 157        |
| V.2.4.2  | Cas des joints de grains . . . . .                                    | 157        |
| V.2.5  | Concentration des défauts ponctuels . . . . .                         | 158        |
| V.2.6  | Théorie cinétique . . . . .   | 158        |
| V.3  | Constats expérimentaux et analyses micromécaniques . . . . .          | 161        |
| V.3.1  | Croissance libre . . . . .  | 161        |
| V.3.2  | Fluage sous irradiation . . . . .                                     | 163        |
| V.3.3  | Fluage thermique . . . . .  | 164        |
| V.3.3.1  | Fluage thermique sous flux . . . . .                                  | 164        |
| V.3.3.2  | Fluage thermique hors flux sur matière irradiée . . . . .             | 165        |
| V.3.4  | Mécanismes de déformation sous irradiation . . . . .                  | 166        |
| V.3.4.1  | Stress Induced Preferential Absorption (SIPA) . . . . .               | 167        |
| V.3.4.2  | Stress Induced Preferential Nucleation (SIPN) . . . . .               | 168        |
| V.3.4.3  | Climb Plus Glide (CPG) . . . . .                                      | 168        |
| V.3.5  | Proposition d'une démarche de modélisation . . . . .                  | 169        |
| V.3.5.1  | Evolution de la densité de puits . . . . .                            | 169        |
| V.3.5.2  | Vitesse de déformation . . . . .                                      | 171        |
| <b>Conclusions &amp; Perspectives</b>  |   | <b>173</b> |
| Conclusions  | . . . . .   | 173        |
| Perspectives   | . . . . .   | 175        |
| <b>Annexes</b>   |   | <b>177</b> |
| <b>A Problème de l'inclusion d'Eshelby</b>   |   | <b>177</b> |
| A.1  | Tenseur d'Eshelby d'une inclusion ellipsoïdale . . . . .              | 177        |
| A.2  | Champ de contrainte dans l'inclusion . . . . .                        | 178        |
| A.3  | Approche ellipsoïdale de l'effet de forme en non linéaire . . . . .   | 179        |
| <b>B Comportement de l'estimateur <math>p(\varphi)</math> dans un milieu élastique</b> |   | <b>181</b> |
| B.1  | Description du problème théorique . . . . .                           | 181        |
| B.1.1  | Comportement effectif du polycristal . . . . .                        | 181        |
| B.1.2  | Contraintes dans l'inclusion . . . . .                                | 182        |
| B.2  | Convergence statistique de l'estimateur $p$ . . . . .                 | 183        |

---

|  |            |
|--|------------|
| <b>C Les contraintes résiduelles d'origine thermique</b>             | <b>185</b> |
| C.1 Estimation des contraintes résiduelles . . . . .                 | 185        |
| C.1.1 Estimation EF des contraintes résiduelles . . . . .            | 187        |
| C.1.2 Estimation par un modèle de comportement analytique . . . . .  | 187        |
| C.1.3 Résultats . . . . .  | 189        |
| C.2 Implémentation dans le modèle polycristallin . . . . .           | 189        |
| <b>D Effet du voisinage sur le comportement d'un grain</b>           | <b>191</b> |
| D.1 Champs mécaniques . . . . .                                      | 191        |
| D.2 Impact du voisinage sur la convergence de l'estimation . . . . . | 193        |
| D.3 Hétérogénéité de comportement au sein d'une même phase . . . . . | 194        |
| <b>Références bibliographiques</b>                                   | <b>211</b> |
| <b>Résumé &amp; Abstract</b>   | <b>212</b> |





*Rien n'est plus proche du vrai que le faux.*

*Albert EINSTEIN*



---

# Nomenclature

---

## Grandeurs tensorielles et opérateurs :

|   |  |
|---|--|
| $A, B, C$   | Tenseurs d'ordre 0 (Scalars)           |
| $\underline{A}, \underline{B}, \underline{C}$   | Tenseurs d'ordre 1                     |
| $\underline{\underline{A}}, \underline{\underline{B}}, \underline{\underline{C}}$     | Tenseurs d'ordre 2                     |
| $\mathbb{A}, \mathbb{B}, \mathbb{C}$  | Tenseurs d'ordre 4                     |
| $\underline{\underline{I}}$   | Tenseur Identité d'ordre 2             |
| $\mathbb{I}$  | Tenseur Identité d'ordre 4             |
| $\mathbb{K} = \frac{1}{3}\underline{\underline{I}} \otimes \underline{\underline{I}}$ | Projecteur sphérique                   |
| $\mathbb{J} = \mathbb{I} - \mathbb{K}$  | Projecteur déviatorique                |
| $\otimes$   | Produit tensoriel dyadique             |
| $\cdot$   | Produit scalaire                       |
| $:$   | Produit tensoriel doublement contracté |

## Grandeurs mécaniques et opérateurs :

|   |   |
|---|---|
| $x$   | Propriété microscopique d'un polycristal                          |
| $\tilde{x}$   | Propriété effective du polycristal associée à $x$                 |
| $\underline{\underline{\varepsilon}}$   | Tenseur des déformations  |
| $\underline{\underline{\sigma}}$  | Tenseur des contraintes   |
| $\underline{\underline{E}}$   | Tenseur des déformations à l'échelle macroscopique                |
| $\underline{\underline{\Sigma}}$  | Tenseur des contraintes à l'échelle macroscopique                 |
| tr  | Opérateur trace   |
| $J_2(\underline{\underline{\Sigma}}) = \sqrt{\frac{3}{2}\underline{\underline{\Sigma}} : \underline{\underline{\Sigma}}}$ | Contrainte équivalente  |
| $\ \underline{\underline{E}}\  = \sqrt{\frac{2}{3}\text{tr}(\underline{\underline{E}}^2)}$                                | Déformation équivalente   |
| $\underline{\underline{\mu}}^s$   | Tenseur d'orientation d'un système de glissement $s$              |
| $\langle X \rangle_G$   | Moyenne de $X$ sur l'ensemble $G$                                 |
| $\text{SD}(X)_E$  | Ecart type (Standard Deviation) de $X$ sur l'espace $E$           |
| $G$   | Ensemble des phases cristallographiques d'un polycristal          |
| $\mathbb{S}^E$  | Tenseur d'Eshelby   |
| $\mathbb{S}^E = \alpha_E \mathbb{K} + \beta_E \mathbb{J}$   | Tenseur d'Eshelby pour une sphère incluse dans un milieu isotrope |

*Principaux acronymes et abréviations :*

---

|      |   |
|------|---|
| BCC  | Cubique centré  |
| DP   | Défaut Ponctuel   |
| DRX  | Diffraction aux Rayons X  |
| EF   | Elements Finis  |
| EVP  | Elasto-Visco-Plastique  |
| EBSD | Electron BackScatter Diffraction (diffraction rétro-diffusée des électrons) |
| FCC  | Cubique faces centrées  |
| FDOC | Fonction de Distribution des Orientations Cristallines                      |
| HCP  | Hexagonal Close-Packed  |
| MET  | Microscopie Electronique en Transmission                                    |
| M5®  | Alliage de Zirconium breveté par AREVA (Zr-1%wt Nb)                         |
| REP  | Réacteur à Eau sous Pression  |
| UMAT | User Material (Subroutine Abaqus ou CAST3M)                                 |
| VER  | Volume Elémentaire Représentatif  |
| VPSC | ViscoPlastic Self Consistent  |
| Zy-4 | Zircaloy-4  |

---

# Introduction

---

L'étude du comportement mécanique des matériaux métalliques est un axe de recherche très développé en raison de l'utilisation massive des métaux et alliages dans de nombreux secteurs industriels. De l'automobile au nucléaire en passant par l'aérospatial, tous utilisent des alliages métalliques en tant que matériaux de structure. Dans un contexte industriel fortement concurrentiel, une connaissance approfondie des mécanismes physiques gouvernant les évolutions dimensionnelles des matériaux de structures constitue un avantage indéniable. Cette compréhension des phénomènes à une échelle assez fine peut aboutir, entre autres, à une justification de la tenue mécanique des matériaux mieux adaptée face aux critères de sécurité parfois très exigeants.

Dans un contexte de réchauffement climatique avéré [Pachauri 07], l'industrie électro-nucléaire fournit une solution pour produire massivement de l'énergie sans émettre de gaz à effet de serre. Celle-ci permet de répondre à l'un des enjeux du protocole de Kyoto qui prévoit une réduction globale de 5,2 % des émissions de dioxyde de carbone, principal vecteur de l'évolution du climat, d'ici 2012 par rapport aux émissions de 1990.

Cette industrie repose sur l'énergie que dégage la fission d'un noyau atomique. Comme l'a montré Einstein [Einstein 05], dans le cadre de la théorie de la relativité restreinte, l'énergie disponible dans la matière est donnée par l'équivalence masse / énergie *via* la relation  $E = m.c^2$ . Ainsi, une faible masse d'atome fissile peut être transformée en une quantité très importante d'énergie (via le facteur de célérité au carré). L'idée consiste alors à récupérer cette énergie sous forme thermique en faisant circuler un fluide caloporteur autour des tubes dans lesquels sont confinées ces réactions nucléaires auto-entretenues. Afin que les échanges thermiques opèrent dans de meilleures conditions, le fluide caloporteur des réacteurs de type REP (Réacteur à Eau sous Pression) du circuit primaire est maintenu à l'état liquide grâce à une pression élevée (155 bars). On vient alors, par l'intermédiaire d'un circuit secondaire, récupérer cette énergie en vaporisant l'eau du circuit secondaire grâce à la chaleur dégagée par le circuit primaire. Cette vapeur est acheminée vers des turbines qui, entraînant un alternateur, produisent de l'électricité. L'eau est alors refroidie par une source froide et repart pour un nouveau cycle. Ce principe de fonctionnement est schématisé sur la figure 1.

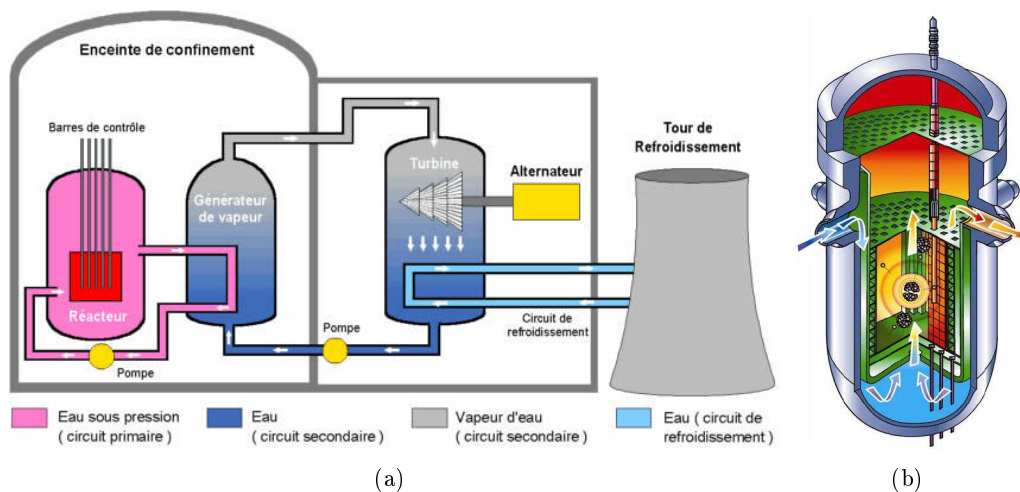


FIG. 1 – (a) Principe de la production électro-nucléaire et (b) schéma d'un cœur de Réacteur à Eau sous Pression [Source : (a) [www.guards-formation.com](http://www.guards-formation.com) et (b) [www.cea.fr](http://www.cea.fr)].

Les deux premiers réacteurs de génération III+ de type EPR développés par AREVA NP sont actuellement en construction sur les sites de Olkiluoto en Finlande et de Flamanville en France. Ils devraient être opérationnels en 2012 et en 2014. La construction de deux autres EPR a également débuté en Chine sur le site de Taishan. L'EPR constitue à ce jour l'évolution la plus avancée des réacteurs à eau sous pression. Dans ces centrales nucléaires de nouvelle génération, le confinement des radionucléides est assuré par trois barrières rendant le dispositif étanche vis-à-vis de la dissémination de matières radioactives dans la biosphère. Dans les réacteurs à neutrons thermiques\*, la première barrière d'étanchéité est la gaine métallique qui enveloppe les pastilles de combustible et dont le matériau constitutif est un alliage de zirconium. La seconde barrière est la cuve en acier qui constitue la peau extérieure du cœur du réacteur, et la troisième est l'enceinte de confinement en béton armé qui est dimensionnée de façon à résister à des augmentations très rapides de la pression (crash d'avion ou encore accident de cœur). Plusieurs raisons ont abouti au choix du zirconium en tant que matériau de structure pour le combustible nucléaire :

- Transparence aux neutrons thermiques.
- Très bonne résistance à la corrosion et à l'hydruration.
- Bonnes propriétés mécaniques.
- Bonne stabilité des propriétés mécaniques sous irradiation.

\*A différencier des réacteurs à neutrons rapides où le gainage du combustible ne doit pas nécessairement posséder des caractéristiques de transparence aux neutrons grâce à l'énergie élevée des neutrons.

Les meilleurs matériaux qui vérifient ces conditions sont les alliages de zirconium. Ils présentent une section efficace d'absorption des neutrons thermiques très faible (0,184 barn), un gain de masse en corrosion relativement faible vis-à-vis du temps d'utilisation (surtout pour l'alliage M5® (Zr-1%wtNb) qui ne présente pas d'accélération de sa cinétique de corrosion aux forts taux d'épuisement contrairement au Zircaloy-4 (voir Fig.2(a))), et des propriétés mécaniques satisfaisantes.

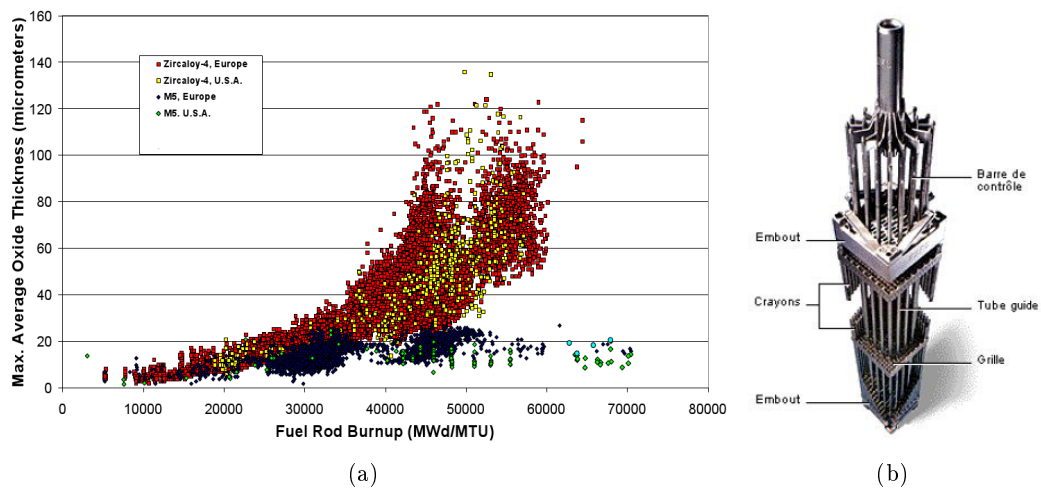


FIG. 2 – (a) Évolution de l'épaisseur de la couche d'oxyde sur deux alliages de zirconium (Zircaloy-4 et M5®) en fonction du taux de combustion [Garner 07] et (b) photographie d'un assemblage combustible [Source : [www.areva.com](http://www.areva.com)]

Les assemblages combustibles sont situés dans le cœur du réacteur nucléaire. Un assemblage 17x17 est constitué de 264 crayons combustibles en alliage de zirconium, d'environ quatre mètres de long, scellés aux deux extrémités par des bouchons. Un crayon contient environ 350 pastilles d'uranium enrichi (autour de 4%). Le squelette de l'assemblage combustible (voir Fig.2(b)) est constitué des tubes guides soudés aux grilles. Les tubes guides permettent à la fois d'assurer à l'assemblage une bonne tenue mécanique, mais également de contrôler la criticité du réacteur par l'introduction de barres de commande neutrophages. Un réacteur REP de 1300 MWe contient 193 assemblages, soit 104 tonnes d'uranium sous forme de quelques 16 millions de pastilles réparties dans 51 000 crayons. A la fin de chaque cycle, une partie des assemblages combustibles est renouvelé. Le combustible est donc un composant consommable qu'il est nécessaire de recharger régulièrement pour garantir un niveau minimal de puissance au réacteur et donc une production électrique constante de la centrale.

Les crayons combustibles sont des pièces maîtresses dans un réacteur nucléaire puisqu'ils fournissent l'énergie permettant de chauffer l'eau du circuit primaire. Les pastilles



d'uranium enrichi en  $U^{235}$  sont comprimées à l'aide d'un ressort aménageant en partie supérieure du crayon une chambre d'expansion qui permet de limiter la pression interne due au relâchement des gaz de fission. Les crayons sont pressurisés à l'hélium, de façon à diminuer les contraintes exercées par le fluide caloporteur.

Dans le but d'améliorer la rentabilité de la filière électro-nucléaire, les exploitants cherchent à prolonger la durée de vie des assemblages combustibles, mais également à augmenter le taux de combustion. Cette volonté d'accroître les performances du combustible n'est pas sans conséquences sur le matériau de gainage qui subit de fait des sollicitations thermomécaniques plus importantes. Sous l'action conjuguée d'un flux neutronique plus intense et d'une période d'utilisation prolongée, la gaine "s'endommage" plus et les fabricants doivent garantir aux autorités de sûreté nucléaire l'intégrité mécanique du gainage pour ces sollicitations accrues. Lorsqu'il est déchargé du cœur, le combustible est stocké en piscine avant d'être transporté vers les sites de recyclage. L'objectif de ce stockage est de dissiper une part importante de la puissance résiduelle contenue dans les crayons combustibles afin d'éviter un échauffement trop important lors de la phase de transport. Ce n'est donc pas uniquement les propriétés en service qui constituent des critères dimensionnants vis-à-vis de l'intégrité du gainage mais c'est également l'aval du cycle (transport, stockage et recyclage) qui doit être pris en compte dès les phases de conception. Nous comprenons alors que les alliages de zirconium sont des matériaux nucléaires stratégiques pour lesquels un gain de performance constitue une réelle avancée. Une meilleure utilisation du combustible permet d'extraire une quantité d'énergie plus importante des crayons et également de diminuer la quantité de déchets nucléaires. Cette optimisation du combustible doit se faire en garantissant l'intégrité de la gaine pendant toute sa durée de vie.

Les alliages de zirconium utilisés dans les centrales nucléaires sont des polycristaux hexagonaux fortement texturés présentant une anisotropie de comportement élasto-visco-plastique (EVP) marquée. Nous souhaitons développer dans cette étude des modèles de comportement fondés sur une description des caractéristiques microstructurales des alliages. L'objectif poursuivi dans cette thèse est d'aboutir à une modélisation robuste du comportement mécanique de ces alliages en tenant compte de leur anisotropie. L'intégration des mécanismes de déformation EVP dans les modèles nécessite le développement de modèles micro/macro dans lesquels des règles de changements d'échelle permettent de passer du comportement d'une phase cristalline au comportement macro-homogène d'un polycristal. Dans ces travaux, l'alliage étudié est le Zircaloy-4 dans un état métallurgique recristallisé conférant à la microstructure des grains équiaxes avec une densité initiale de dislocations faible.

Ces travaux de recherches ont été entrepris dans le cadre d'une thèse CIFRE pour le département matériaux et thermomécanique du pôle amont d'AREVA. Parallèlement à ces travaux de modélisation du comportement mécanique, des études de nature expérimentale ont été engagées afin de caractériser le comportement en fluage [Grosjean 09, Rautenberg 09] des alliages de zirconium. Ce travail résulte donc d'une

étroite collaboration entre ces trois études.

Dans ce manuscrit, nous dressons, dans un premier chapitre, un état de l'art sur la thermomécanique des alliages de zirconium. Les mécanismes de déformation thermiquement activés et les différentes approches utilisées dans le domaine de l'homogénéisation des polycristaux y sont discutés. Dans un second chapitre, nous détaillons les résultats expérimentaux obtenus en fluage et en relaxation sur un alliage Zircaloy-4 (Zy-4) recristallisé que nous analysons à la lumière d'un formalisme micromécanique. Dans une troisième partie, nous présentons une méthode d'estimation statistique originale, développée au cours de cette thèse, fondée sur des calculs éléments finis d'agrégats. L'objectif poursuivi est de qualifier l'estimation auto-cohérente de modèles à champs moyens afin de prendre en compte certaines spécificités de la structure hexagonale dans les règles de transition d'échelle. Nous développons, par la suite, la modélisation du comportement mécanique en détaillant les différentes stratégies de modélisation élaborées au cours de cette étude. Pour terminer, les prémices d'une modélisation micromécanique intégrant certains effets de l'irradiation sont proposées. Le manuscrit s'achève en dressant les principales conclusions et perspectives de ce travail.

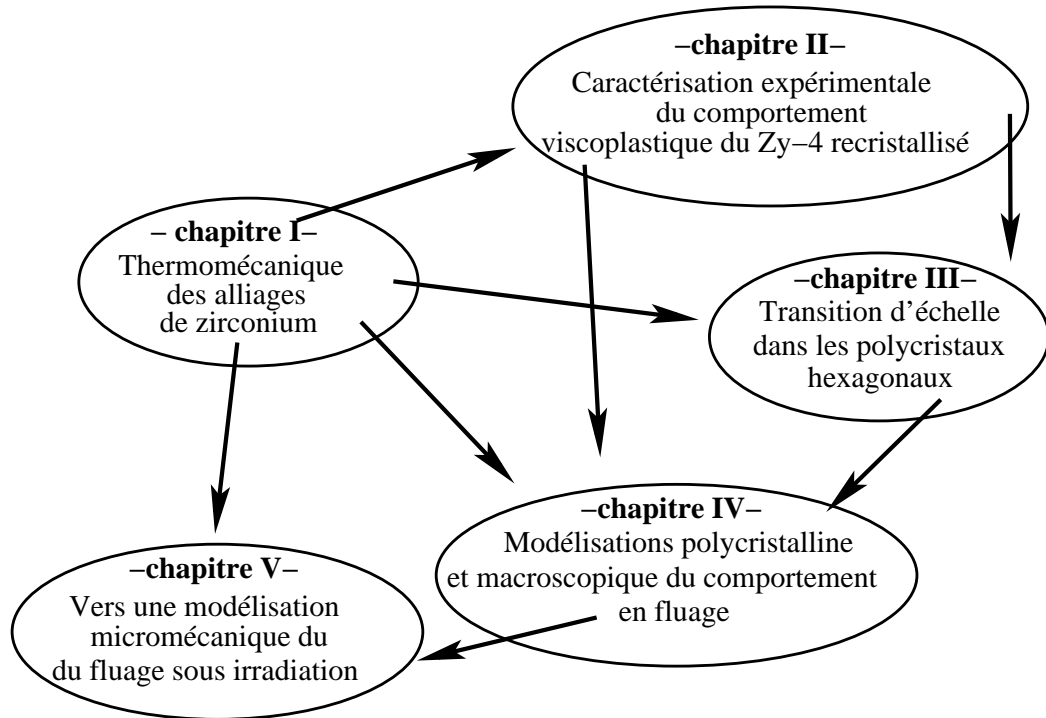


FIG. 3 – Guide de lecture du manuscrit.



# Chapitre I

---

## Thermomécanique des alliages de zirconium

---

### I.1 Introduction

L'optimisation des propriétés mécaniques des matériaux de structures constitue une préoccupation majeure dans bon nombre d'industries. Les approches multi-échelles, en plein essor, permettent une prise en compte des mécanismes de déformation à une échelle plus locale que la plupart des modèles macroscopiques. Cependant, ces approches sont souvent trop lourdes pour être directement implémentées dans des codes de calculs industriels. Elles peuvent aboutir, si on les manipule avec précaution, à une meilleure compréhension des phénomènes responsables du comportement des structures. Ces outils peuvent donc servir d'aide à la conception de produits industriels.

L'objectif de ce chapitre est de fournir les outils nécessaires à la lecture des chapitres suivants, et également de donner quelques éléments bibliographiques concernant les principaux mécanismes responsables du comportement élasto-visco-plastique des alliages de zirconium, ainsi que quelques éléments historiques concernant les techniques de changement d'échelles dans les polycristaux.

### I.2 Les alliages de zirconium

Le zirconium est un métal de transition de numéro atomique 40 appartenant à la colonne IV-A de la classification périodique des éléments tout comme le titane et l'hafnium. Il présente deux variétés allotropiques à pression atmosphérique : la phase hexagonale ou phase  $\alpha$  stable en dessous de  $T_{\alpha\beta}=862^{\circ}\text{C}$  (où  $T_{\alpha\beta}$  est la température de transus  $\alpha/\beta$ ) et une phase  $\beta$  cubique centrée stable jusqu'à  $T_f=1850^{\circ}\text{C}$  avec  $T_f$  la

température de fusion du zirconium.

Dans le cas des alliages de zirconium, pour des températures inférieures à  $T_{\alpha\beta}$ , le zirconium étant le composé principal, il impose sa structure à l'édifice cristallin, à savoir un empilement pseudocompact de sphères dures du type ABABA... En effet, la structure idéale est décrite par un empilement de plans denses parallèlement au plan de base comme le montre la figure I.1. Suivant ce modèle, le rapport entre la hauteur du prisme et le côté de l'hexagone vaut  $c/a \approx 1,633$ . En ce qui concerne le zirconium  $\alpha$ , ce rapport vaut 1,593 à 20°C. La maille primitive de cette structure contient deux atomes placés en  $(0,0,0)$  et en  $(1/3, 2/3, 1/2)$ . Dans le but de symétriser les écritures des plans et droites dans l'espace, nous utiliserons les notations de Miller à 4 indices ( $hkil$ ) avec  $h + k + i = 0$ . Cette notation nous permettra de distinguer sans difficulté les directions ou plans équivalents par permutation circulaire des trois premiers indices.

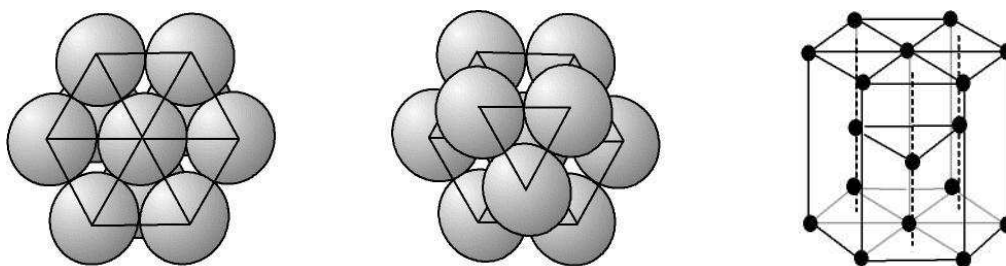


FIG. I.1 – Empilement hexagonal compact et maille élémentaire hexagonale.

### I.3 Evolution de la composition chimique des alliages de Zr

Le Zircaloy-4 est l'alliage qui est historiquement utilisé dans les réacteurs nucléaires depuis les débuts de l'industrie électro-nucléaire. Il est progressivement remplacé par de nouveaux alliages qui permettent d'optimiser les performances globales du combustible nucléaire.

Dès le début des années 1990, on a remarqué que l'adjonction de niobium permettait d'accroître considérablement les propriétés du gainage en terme de résistance à la corrosion aqueuse. Comme exposé en introduction de ce manuscrit (Fig. 2), le Zy-4 présente une accélération de sa cinétique de corrosion pour des taux de combustion proches de 30GWd/tU alors que celle du M5® reste stable avec un taux de croissance de la couche d'oxyde constant. L'épaississement accéléré de la couche d'oxyde dans le cas du Zy-4 conduit à une desquamation prématurée de la gaine et donc à une perte importante de sa tenue mécanique néfaste pour les performances globales du combustible. Il apparaît donc que cette modification de la composition chimique constitue un réel bénéfice pour le rendement énergétique du crayon combustible.

Concernant l'évolution de la teneur en soufre des alliages de zirconium, des chercheurs d'AREVA ont montré [Charquet 98] que l'ajout de quelques ppm de soufre suffisait à diviser par trois les vitesses de fluage des alliages de zirconium à 400°C (voir Fig. I.2(b)). Ferrer résume ainsi l'impact du soufre sur le comportement mécanique des alliages de zirconium [Ferrer 00, Ferrer 01] : “*Après avoir envisagé différentes hypothèses, nous suggérons que le soufre ségrège dans le cœur des dislocations vis  $\langle a \rangle$  et en modifie la structure*”. Selon cet auteur, cette modification de la structure de cœur des dislocations, vecteur de la viscoplasticité dans les composés cristallins, modifie localement les profondeurs des vallées de Peierls. Il en résulte une résistance accrue à l'écoulement plastique et donc en une diminution des vitesses de fluage macroscopique.

Dans cette étude, nous nous focalisons sur l'étude du comportement de l'alliage Zy-4 recristallisé. La composition chimique de cet alliage est rappelée dans la Table I.1.

| Eléments | Sn   | Fe   | Cr   | O    | S           | Nb  | Zr   |
|----------|------|------|------|------|-------------|-----|------|
|          | wt % | wt % | wt % | wt % | ppm         | wt% |      |
| Zy-4     | 1,29 | 0,22 | 0,12 | 0,14 | $\simeq 24$ | 0   | Bal. |

TAB. I.1 – Composition chimique typique d'un alliage Zy-4 recristallisé.

De récents travaux concernant l'impact du chrome sur la tenue en fluage [Jung 10] indiquent un effet bénéfique similaire à celui de l'étain. Les auteurs de cette étude concluent que, malgré la faible solubilité du chrome, l'augmentation de sa teneur pourrait se substituer à une diminution de la teneur en étain.

De nombreux travaux se sont attachés à étudier l'influence de l'oxygène sur le comportement mécanique des alliages de zirconium [Kelly 73, Thorpe 79, Lee 07]. La forte solubilité de l'oxygène dans le zirconium confère aux alliages chargés en oxygène un durcissement structural de type solution solide (voir Fig. I.2(a)). Les teneurs couramment rencontrées dans les produits industriels des réacteurs commerciaux sont autour de 1400 ppm.

## I.4 Procédé de mise en forme

Le développement de nouveaux alliages réside, entre autres, dans l'augmentation de la teneur en éléments d'addition en vue d'améliorer leur tenue mécanique. Plus chargés en éléments d'addition, ces alliages sont plus difficiles à mettre en forme. En particulier, le laminage des tubes devient une étape plus complexe. Le procédé de mise en forme utilisé pour produire les tubes de gainage (ainsi que les tubes guides) à l'échelle industrielle est le laminage à pas de pèlerin. Ce procédé de mise en forme est réalisé à froid en trois passes de laminage successives entrecoupées par des traitements thermiques permettant de restaurer une part importante des contraintes internes stockées au cours de la mise

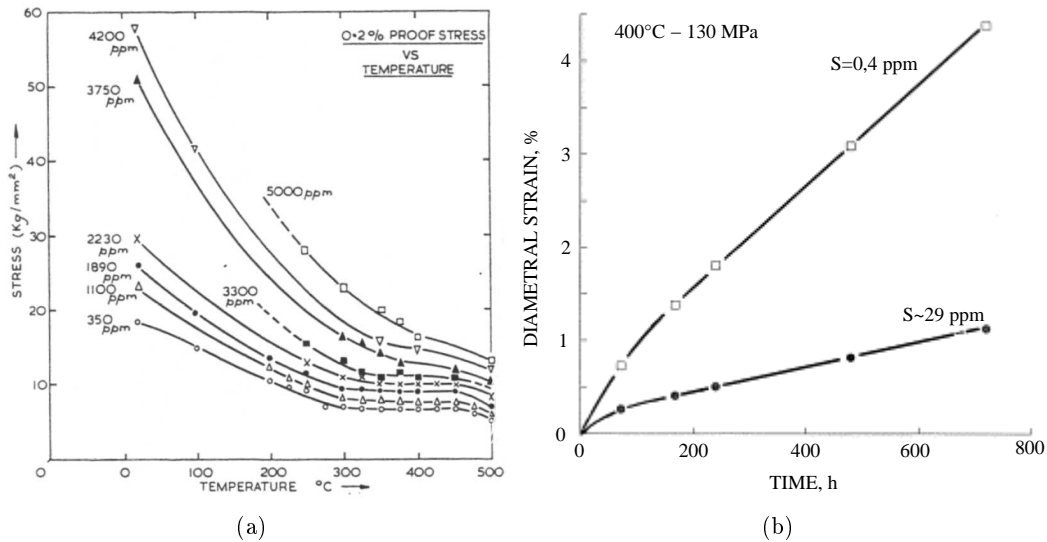


FIG. I.2 – (a) Evolution de la limite d'élasticité conventionnelle à 0,2% en fonction de la température pour différentes teneurs en oxygène [Kelly 73] et (b) impact d'une faible teneur en soufre sur la tenue en fluage circonférentiel à  $400^{\circ}\text{C}$  d'un Zr-1%Nb recristallisé [Charquet 98].

en forme du produit industriel. Les traitements thermiques permettent également de maîtriser la distribution des précipités au sein du matériau. Notons que sous l'effet des frottements entre le tube et les outils, même avec une lubrification adaptée, il se produit un échauffement important sous l'effet de la dissipation plastique de l'alliage.

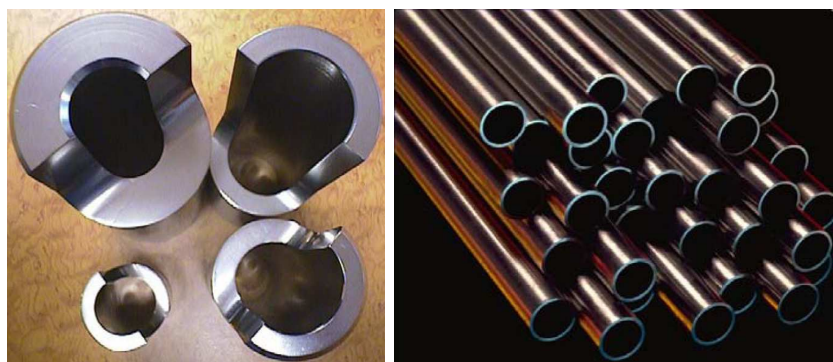


FIG. I.3 – De l'ébauche au produit fini [Source : [www.aveva.com](http://www.aveva.com)].

Un mandrin est placé à l'intérieur d'une ébauche cylindrique, le passage cadencé de deux matrices permet d'écraser l'ébauche sur le mandrin et d'imposer la géométrie retenue au produit tubulaire. A chaque coup de cage, le tube est tourné de  $57^{\circ}$  pour assurer un profil circulaire au tube ainsi qu'un trajet de chargement homogène dans la

circonférence du tube. A partir d'une ébauche cylindrique épaisse, ces trois passes de laminage vont permettre de réduire la section droite d'environ 80 % (voir figure I.3) et d'aboutir au tube gaine final de diamètre extérieur 9,5mm et d'épaisseur 0,57mm. Dans le cas d'un tube guide, la géométrie sera légèrement différente avec une épaisseur plus faible et un diamètre extérieur plus important.

Après la dernière passe de laminage, un traitement thermique permet de contrôler l'état métallurgique du produit final. Avec un traitement à 475°C pendant deux heures, le produit sera dans un état détendu, il présentera alors des grains très allongés dans la direction de laminage ainsi qu'une densité de dislocations importante. Avec un recuit à 650°C pendant deux heures, le produit sera recristallisé, les grains présenteront une structure équiaxe et auront une très faible densité de dislocations (inférieure à  $10^{+11}m/m^3$ ). En effet, une température de recuit plus élevée associée à une durée de maintien plus longue permet d'apporter suffisamment d'énergie au matériau pour que de nouveaux grains germent rendant la microstructure équiaxe et quasiment vierge de toute dislocation (cf Fig. I.4).

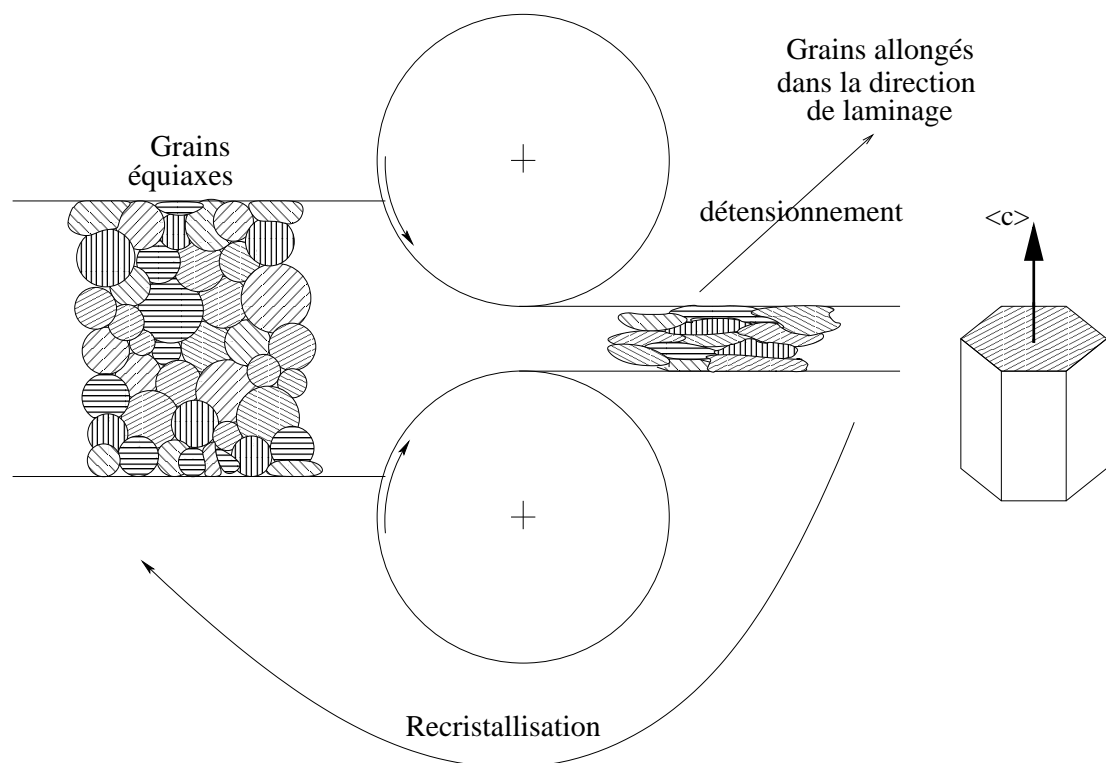


FIG. I.4 – Mise en forme d'un produit par laminage.



Si l'on souhaite élaborer un modèle de comportement capable de prendre en compte l'état métallurgique du produit, il semble judicieux d'y introduire des grandeurs caractéristiques de l'état initial considéré. Nous pouvons par exemple penser à la forme des grains (sphérique dans le cas d'un alliage recristallisé et très allongée dans la direction de laminage dans le cas d'un état détendu) et la densité de dislocations initiale. Remarquons que ces grandeurs sont accessibles à partir d'analyses EBSD et de clichés MET. Nous pouvons penser que cela suffit à différencier le comportement mécanique entre un produit détendu et un produit recristallisé (à composition chimique fixée) puisque les différences entre les deux états métallurgiques seraient directement introduites dans les conditions initiales du modèle. Notons tout de même que deux traitements thermiques différents peuvent conduire à des microstructures de précipitation différentes qu'il faudrait également prendre en compte. Citons ici le travail de Fandeur [Fandeur 01] qui s'est intéressé dans sa thèse à développer des approches micromécaniques pour l'alliage Zy-4 détendu pour les appliquer à la problématique de l'interaction pastille/gaine. Son objectif était de disposer d'un outil numérique fiable permettant d'estimer de façon satisfaisante les champs mécaniques locaux en pointe d'une fissure générée par un mécanisme de corrosion sous contrainte.

## I.5 Texture cristallographique

La texture cristallographique d'un polycristal est une donnée fondamentale pour caractériser l'anisotropie de comportement thermique ou mécanique. Il s'agit de la distribution statistique des orientations cristallines au sein du polycristal. Bien souvent, les propriétés d'un polycristal sont fortement affectées par sa texture cristallographique. L'anisotropie de comportement d'un polycristal est directement reliée à cette information. Un polycristal à texture isotrope, pourtant constitué de grains ayant un comportement anisotrope, a un comportement macroscopique isotrope. L'isotropie de distribution à l'échelle macroscopique est capable de gommer les anisotropies locales de comportement. C'est pourquoi, il est indispensable de disposer d'outils permettant de caractériser les textures dans les matériaux polycristallins.

### I.5.1 Analyse expérimentale

Expérimentalement, on accède à cette information par des techniques de diffraction (DRX, EBSD ou neutrons) qui nous fournissent la Fonction de Distribution des Orientations Cristallines (FDOC). Une fois traitées, les données expérimentales se présentent sous la forme d'un tableau contenant l'ensemble des orientations cristallines associées à leur fraction volumique. L'orientation de chaque phase est caractérisée par un triplet d'angles d'Euler usuellement notés  $\underline{g} = (\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$  dans le domaine de l'analyse des textures. Il est important d'avoir conscience du fait que l'on perd la notion de grain lors de cette caractérisation. En effet, l'ensemble des grains de même orientation cristalline contribue à l'intensité de la même raie de diffraction. La notion de grain est alors remplacée par la notion de phase cristalline qui regroupe l'ensemble des grains de

même orientation. La FDOC constitue une description statistique de cette distribution\* permettant d'évaluer la fraction volumique de grains possédant une orientation  $\underline{g}$  à  $d\underline{g}$  près au travers de la relation I.1.

$$\text{FDOC}(\underline{g})d\underline{g} = \frac{dV}{|V|} \quad (\text{I.1})$$

Lorsque l'on caractérise la texture d'un polycristal par une technique DRX, on utilise généralement un goniomètre de texture permettant de mesurer pour chaque position du faisceau incident l'intensité du rayonnement diffracté. Cette intensité relevée sur le capteur est directement proportionnelle au nombre de cristaux en position diffractante. A partir de la figure de pôles mesurée expérimentalement, la texture complète est reconstruite en utilisant des méthodes harmoniques ou bien vectorielles [Béchade 93]. L'inconvénient des méthodes de décomposition fondées sur le développement en harmoniques sphériques généralisées est que, pour les très faibles fractions volumiques, la décomposition peut conduire à des fractions volumiques légèrement négatives. Il est donc nécessaire de seuiller les faibles fractions volumiques si l'on souhaite éviter cet effet indésirable.

### I.5.2 Figures de pôles

En plus de la structure cristalline hexagonale faiblement symétrique qui permet d'expliquer une part importante de l'anisotropie des alliages de zirconium [Geyer 99a], les produits élaborés industriellement sont fortement texturés. Il existe d'ailleurs un lien entre cette anisotropie locale et l'apparition d'une texture prononcée au cours du processus de mise en forme. La mise en forme des produits impose des orientations préférentielles aux grains et est à l'origine d'une forte anisotropie du produit. Une analyse par diffraction aux rayons X permet de remonter à la FDOC et aux tracés des figures de pôles directes et inverses (Fig. I.5). Celles-ci mettent en évidence qu'une large proportion des grains sont distribués dans les plans radiaux du tube avec leurs axes  $\langle c \rangle$  pointant à  $\pm 30^\circ$  de la direction radiale du tube pour un alliage recristallisé. On dit que les produits élaborés ont une texture radiale (ou texture à lunette). La projection stéréographique directe d'une direction cristallographique donnée permet de visualiser cette direction dans le repère cylindrique associé au tube alors que la projection stéréographique inverse constitue une représentation duale, c'est-à-dire la projection d'une direction macroscopique exprimée dans le repère du cristal. Le plus souvent, pour des raisons de symétrie, on ne représente que le triangle standard. Une autre manière de caractériser globalement la texture d'un produit est de calculer les facteurs de Kearns associés.

### I.5.3 Facteurs de Kearns

Considérons  $\underline{\alpha}_g$  une propriété physique tensorielle d'un grain  $g$  (par exemple, le tenseur des coefficients de dilatation thermique). En respectant la symétrie hexagonale,

---

\*LA FDOC est une fonction densité dans l'espace d'Euler

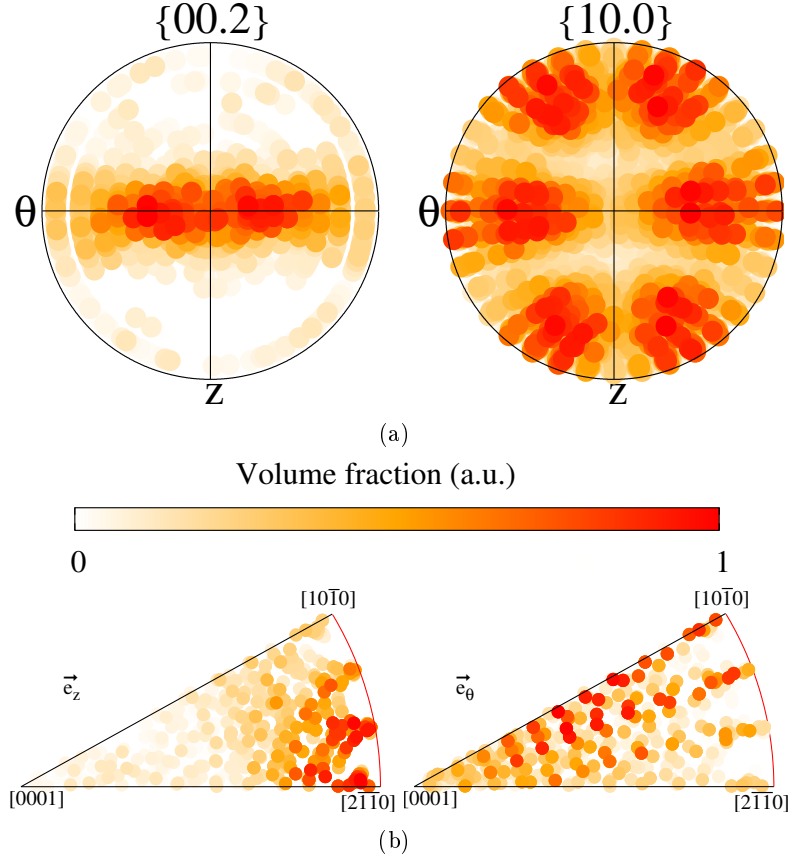


FIG. I.5 – Figures de pôles (a) directes et (b) inverses dans le triangle standard unitaire d'un alliage de zirconium recristallisé (Zy-4).

on peut écrire dans le repère cristallographique,  $\mathcal{R}_g$ , attaché au grain  $g$  :

$$\underline{\underline{\alpha}}_g = \begin{pmatrix} \alpha_a & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_a & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_c \end{pmatrix}_{\mathcal{R}_g} \quad (\text{I.2})$$

Ce qui peut s'écrire intrinsèquement par l'intermédiaire d'un produit tensoriel en fonction de la direction de l'axe  $c$  du grain  $g$  (avec  $\underline{c}_g$  vecteur unitaire) :

$$\underline{\underline{\alpha}}_g = (\alpha_c - \alpha_a)(\underline{c}_g \otimes \underline{c}_g) + \alpha_a \underline{\underline{I}} \quad (\text{I.3})$$

Pour obtenir la grandeur macroscopique effective  $\tilde{\underline{\underline{\alpha}}}$  associée à la propriété microscopique  $\underline{\underline{\alpha}}_g$ , il suffit, dans certaines conditions, de moyenner l'expression I.3 sur l'ensemble du polycristal ( $G$ ) en tenant compte de la fraction volumique ( $f_v^g$ ) de chaque phase. Dans le cadre de la thermoélasticité, on peut montrer [Beran 70, Kondo 10] que le tenseur des coefficients de dilatation effectif  $\tilde{\underline{\underline{\alpha}}}$  s'obtient par une moyenne pondérée :

$$\underline{\tilde{\alpha}} = \left\langle \underline{\alpha}_g : \mathbb{B}_g \right\rangle_{g \in G} \quad (\text{I.4})$$

où  $\mathbb{B}_g$  est le tenseur de localisation élastique de la phase  $g$  et  $\langle . \rangle_{g \in G}$  est l'opérateur de moyenne sur tout le polycristal  $G$ . Cet opérateur de moyenne est défini à partir d'une somme discrète sur l'ensemble des  $N$  phases cristallines constitutives du polycristal par la relation I.5.

$$\langle \underline{X} \rangle_G = \sum_{g \in G} f_v^g \underline{X}^g \quad (\text{I.5})$$

Si l'on considère l'élasticité isotrope<sup>†</sup>, le polycristal est alors homogène élastiquement et le tenseur de localisation  $\mathbb{B}_g$  vaut l'identité ( $\forall g \in G; \mathbb{B}_g = \mathbb{I}$ ). Il vient alors que le comportement effectif s'obtient par une simple opération de moyenne sur le polycristal. On considère l'ensemble  $G$  des phases cristallines présentes dans le polycristal qui est entièrement décrit par la FDOC du polycristal et on obtient :

$$\underline{\tilde{\alpha}} = \left\langle \underline{\alpha}_g \right\rangle_{g \in G} = \alpha_a \left( \underline{I} + k_\alpha \underline{K}_e \right) \quad \text{avec} \quad k_\alpha = \frac{\alpha_c - \alpha_a}{\alpha_a} \quad (\text{I.6})$$

Dans l'expression I.6, le tenseur de Kearns,  $\underline{K}_e$ , a été introduit et est estimé à partir de la relation I.7.

$$\underline{K}_e = \left\langle \underline{c}_g \otimes \underline{c}_g \right\rangle_{g \in G} \quad (\text{I.7})$$

Dans l'hypothèse d'une distribution des orientations cristallines au sein de polycristal respectant rigoureusement les symétries attachées au repère macroscopique, nous trouvons que le tenseur de Kearns  $\underline{K}_e$  est diagonal dans le repère cylindrique,  $\mathcal{R} = (\underline{e}_r, \underline{e}_\theta, \underline{e}_z)$ , attaché à la géométrie tubulaire et l'on a :

$$\underline{K}_e = \begin{pmatrix} f_r & 0 & 0 \\ 0 & f_\theta & 0 \\ 0 & 0 & f_z \end{pmatrix}_{\mathcal{R}} \quad (\text{I.8})$$

Nous introduisons, de cette façon, les facteurs de Kearns  $f_r$ ,  $f_\theta$  et  $f_z$  qui correspondent à la moyenne du carré des cosinus directeurs des axes  $c$  suivant les directions  $r$ ,  $\theta$  et  $z$  et dont la somme doit être unitaire. Expérimentalement, on accède aux valeurs de ces facteurs par DRX. En orientant la normale à la lame diffractante suivant une direction  $d$ , on peut accéder aux facteurs de Kearns suivant la relation proposée par J. J. Kearns [Kearns 65] :

$$f_d = \frac{\int_0^{2\pi} I_\theta^d \sin \theta \cos^2 \theta d\theta}{\int_0^{2\pi} I_\theta^d \sin \theta d\theta} \quad (\text{I.9})$$

---

<sup>†</sup>L'isotropie élastique constitue une hypothèse raisonnable pour les alliages de zirconium comme l'a montré Béchade dans ses travaux de thèse [Béchade 93].

où  $I_{\theta}^d$  est l'intensité diffractée dans la direction  $\theta$ .

Les valeurs typiquement rencontrées pour des produits tubulaires en alliage de zirconium sont  $f_r \simeq 0,6$ ,  $f_{\theta} \simeq 0,3$  et  $f_z \simeq 0,1$ . Comme  $f_r > f_{\theta} > f_z$ , on dit que la texture est fortement radiale. Naturellement, une texture isotrope correspond à la situation où toutes les orientations sont équiprobables ( $\underline{\underline{K}}_e = 1/3 \underline{\underline{I}}$  et  $f_r = f_{\theta} = f_z = 1/3$ ).

## I.6 Mécanismes de déformation à chaud

Les mécanismes de déformation EVP sont très variés dans les alliages de zirconium mais, la plupart du temps, un mécanisme prédomine et permet de rendre compte d'une part prépondérante de la déformation observée. En fonction des conditions d'utilisation (principalement la température et le niveau de contrainte appliquée), les mécanismes s'activent ou au contraire ne contribuent pas à la déformation plastique. Il est alors pratique d'utiliser une représentation sous la forme de carte des mécanismes de déformation. C'est Ashby qui le premier a proposé ce type de représentation [Ashby 72]. Knorr et Notis l'ont reprise [Knorr 75] et appliquée au cas du fluage du zirconium (voir Fig. I.6(a) et I.6(b)). Ces cartes permettent notamment d'extrapoler les résultats fournis par les modèles de comportement dans la mesure où les mécanismes de déformation demeurent inchangés.

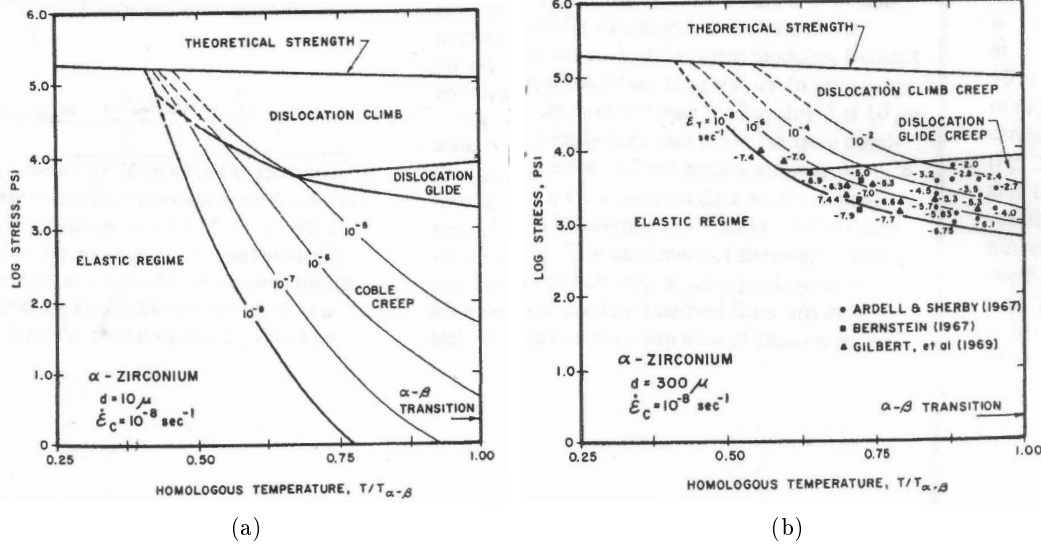


FIG. I.6 – Carte des mécanismes de déformation pour du zirconium- $\alpha$  avec une taille de grain moyenne de (a) 10 et (b) 300  $\mu\text{m}$  [Knorr 75].

Knorr et Notis ne considèrent que trois mécanismes de déformation dans leur étude :

## I.6 Mécanismes de déformation à chaud

le glissement des dislocations, la montée des dislocations et la diffusion aux joints de grains. Les résultats qu'ils obtiennent pour différentes tailles de grains permettent d'observer que plus la taille de grain augmente, et moins le mécanisme de déformation de type Coble par diffusion aux joints de grains est actif. Ce résultat est tout à fait naturel puisque la densité de joints diminue lorsque la taille de grain augmente et donc le moteur de ce mécanisme disparaît.

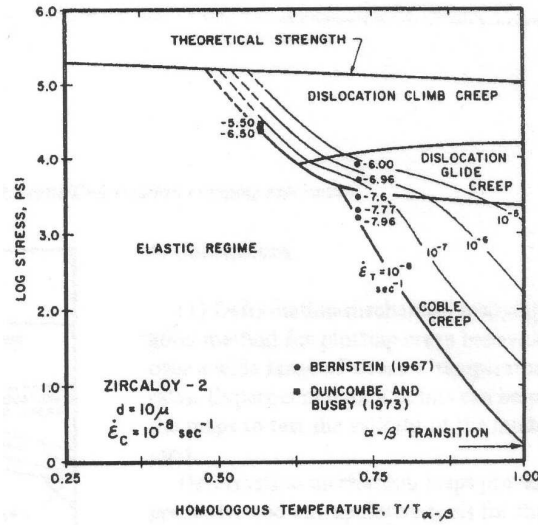


FIG. I.7 – Carte des mécanismes de déformation pour un alliage Zircaloy-2 avec une taille de grain moyenne de  $10\mu\text{m}$  [Knorr 75].

Knorr conclut dans son article [Knorr 75] que les cartes de déformation constituent un outil intéressant pour l'étude du comportement en fluage des matériaux sur une large gamme de contraintes, de températures et de vitesses de déformations. Ces représentations permettent d'accéder à une vision globale et continue des mécanismes de déformation augmentant ainsi l'interprétation physique que l'on peut en avoir. Comme on peut le constater sur la cartographie I.7 des mécanismes réalisée par Knorr pour un alliage Zircaloy-2, le fluage basse contrainte ( $\Sigma < 150\text{MPa} \Leftrightarrow \log_{10}(\Sigma) < 4,33$  psi) à  $400^\circ\text{C}$  ( $T/T_{\alpha-\beta} = 0,6$ ) d'alliages de zirconium à grains fins ( $d = 5\mu\text{m}$ ), est contrôlé par des mécanismes de glissement de dislocations. Cette remarque reste néanmoins à prendre avec les précautions d'usage en raison de la variabilité des éléments d'addition et de la nature expérimentale des résultats sur lesquels reposent de telles conclusions.

### I.6.1 Dislocations - Systèmes de glissement

La notion de dislocations est indispensable pour expliquer la plasticité des matériaux cristallins. C'est le mouvement de ces défauts linéaires qui constitue la brique élémentaire de la plasticité. Les dislocations permettent de rendre compte de la déformation permanente observée lorsque la contrainte appliquée dépasse la limite d'élasticité

d'un polycristal. Lorsque ces dislocations débouchent en surface, elles laissent derrière elles une marche atomique correspondant à l'amplitude du vecteur de Burgers. L'édifice cristallin se déforme ainsi par cisaillement suivant certains systèmes de glissement cristallographique dits "faciles", le système étant formé par la combinaison du plan de glissement (de normale  $\underline{n}$ ) et du vecteur de Burgers ( $\underline{b}$ ).

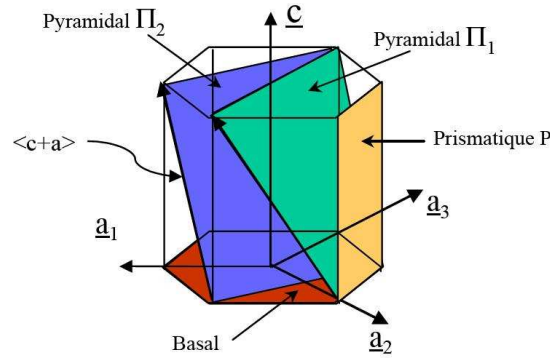


FIG. I.8 – Systèmes de glissement du réseau hexagonal.

Les avancées technologiques considérables des dernières décennies dans le domaine de la microscopie électronique ont permis une observation directe des dislocations dans les matériaux cristallins. Ainsi, est-il communément admis que les métaux hexagonaux sont capables de se déformer suivant quatre plans ( $P$ ,  $B$ ,  $\pi_1$ ,  $\pi_2$ ) et selon deux directions  $\langle a \rangle$  et  $\langle c+a \rangle$  (figure I.8). Les doublets  $(\underline{n}, \underline{b})$  s'agencent selon cinq familles et forment les systèmes de glissement du zirconium. Les familles ainsi formées sont la famille basale ( $B\langle a \rangle$ ), la famille prismatique ( $P\langle a \rangle$ ) et trois familles pyramidales ( $\pi_1\langle a \rangle$ ,  $\pi_1\langle c+a \rangle$  et  $\pi_2\langle c+a \rangle$ ). Ces systèmes de glissement sont détaillés dans le tableau I.2.

| Plans   | Normale $\underline{n}$ | Direction $\underline{b}$                                      | Nombre de systèmes $(\underline{n}, \underline{b})$ |
|---------|-------------------------|--|---|
| $B$     | (0001)                  | $\langle a \rangle = \frac{1}{3} \langle 11\bar{2}0 \rangle$   | 3   |
| $P$     | $\{10\bar{1}0\}$        | $\langle a \rangle = \frac{1}{3} \langle 11\bar{2}0 \rangle$   | 3   |
| $\pi_1$ | $\{10\bar{1}1\}$        | $\langle a \rangle = \frac{1}{3} \langle 11\bar{2}0 \rangle$   | 6   |
| $\pi_1$ | $\{10\bar{1}1\}$        | $\langle c+a \rangle = \frac{1}{3} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ | 12  |
| $\pi_2$ | $\{11\bar{2}2\}$        | $\langle c+a \rangle = \frac{1}{3} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ | 6   |

TAB. I.2 – Les systèmes de glissement dans les alliages de zirconium.

En ce qui concerne l'activation relative de ces systèmes, les études de Geyer [Geyer 99a] et Ferrer [Ferrer 00] confortées par la suite par celle de Onimus [Onimus 03] montrent que le glissement prismatique est le glissement prioritairement activé dans les alliages de zirconium non irradiés. Le glissement pyramidal  $\pi_1\langle a \rangle$  est également fréquemment observé en tant que plan de déviation du glissement prismatique, mais aussi en tant

que glissement simple. Le glissement pyramidal de deuxième espèce  $\pi_2\langle c+a \rangle$  est lui très rarement observé dans le cas des petites déformations. Les autres systèmes sont des plans de glissement secondaire. Les grandeurs physiques pertinentes permettant de décrire la hiérarchie de ces activations relatives étant les cisssions critiques, pour des températures comprises entre 20°C et 400°C, les inégalités I.10<sup>‡</sup> sont satisfaites. Notons que celles-ci sont valables dans l'hypothèse de vitesse de déformation faibles (de l'ordre de  $10^{-3}\text{s}^{-1}$ ).

$$\tau_{P\langle a \rangle} < \tau_{\pi_1\langle a \rangle} < \tau_{B\langle a \rangle} < \tau_{\pi_1\langle c+a \rangle} \quad (\text{I.10})$$

où  $\tau_s$  est la cisssion critique du système de glissement  $s$ .

L'irradiation a pour effet de bouleverser cet ordre établi pour les alliages non irradiés. Suite à une irradiation, le glissement prismatique n'est plus observé et c'est le glissement basal qui s'active [Onimus 04, Onimus 06]. De nombreux auteurs attribuent ce changement à l'évolution de la microstructure sous irradiation. Les défauts ponctuels, générés en grand nombre sous irradiation, s'agglomèrent pour partie sous la forme de boucles de dislocations. Pour des raisons de stabilité énergétique, ces boucles s'accumulent sur les plans prismatiques ce qui a pour effet d'augmenter fortement la cisssion critique des systèmes prismatiques. C'est donc, en partie, pour cette raison que la limite d'élasticité d'un alliage de zirconium irradié est bien plus élevée que celle d'un alliage non irradié.

### I.6.2 Mécanismes thermiquement activés

Dans les composés cristallins, de nombreux processus de déformation font intervenir les dislocations dont le mouvement peut être favorisé par l'agitation thermique. Lorsqu'un polycristal est sollicité à chaud ( $T/T_f > 0,3$  avec  $T_f$  la température de fusion) autour de sa limite d'élasticité macroscopique, si le temps de maintien de la charge est trop court, il ne se passera rien et toute la déformation sera restaurée à la décharge. En revanche, si la durée de maintien est suffisamment longue, l'agitation thermique va permettre aux dislocations de franchir les obstacles de la microstructure, et donc de propager une déformation viscoplastique au sein du polycristal. La probabilité de franchissement des obstacles nous vient de la physique statistique et peut être estimée, dans ce cadre, par la théorie de Boltzmann. Les processus de déformation thermiquement activés dans les matériaux cristallins ont fait l'objet de nombreux travaux de recherches, tant au niveau expérimental que numérique. Caillard et Martin ont récemment publié un ouvrage [Caillard 03] qui fait désormais référence dans le domaine.

#### I.6.2.1 Vieillissement dynamique

Dans les alliages de zirconium, le vieillissement dynamique résulte de l'interaction entre les atomes d'oxygène en solution solide et les dislocations en mouvement. Les

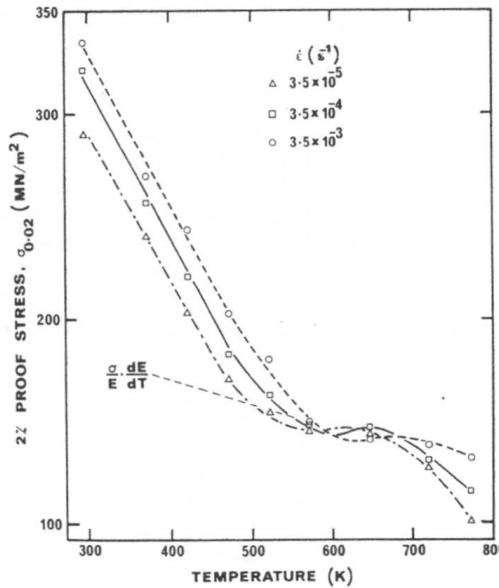
---

<sup>‡</sup>Ces résultats sont issus d'essais de traction pour des vitesses entre  $10^{-5}$  et  $10^{-3} \text{ s}^{-1}$

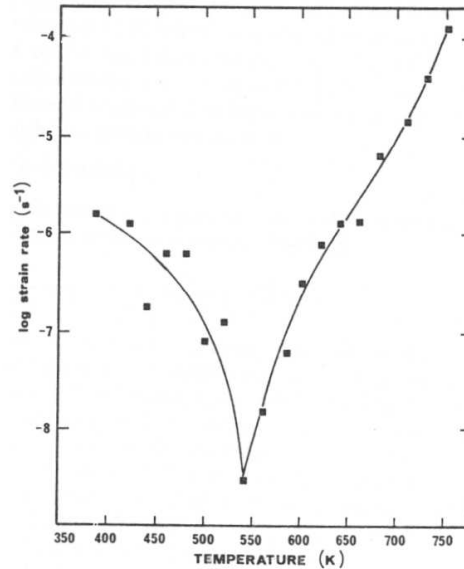


atomes d'oxygène ségrègent autour des dislocations sous la forme de nuages de Cottrell par diffusion, créant ainsi des obstacles supplémentaires pour les dislocations. Les mécanismes d'interaction sont de nature dynamique, c'est-à-dire qu'ils ne sont actifs que si la vitesse de diffusion des atomes d'oxygène est du même ordre de grandeur que la vitesse des dislocations. C'est donc seulement dans un certain domaine de températures et de vitesses de déformation que les effets du vieillissement seront visibles.

A la vue des résultats obtenus par Thorpe et Smith [Thorpe 78c, Thorpe 78a, Thorpe 78b] sur un alliage Zr-1%Nb, il semble que ce soit dans des températures comprises entre 200°C et 350°C que ces alliages sont le plus sensibles aux effets du vieillissement. De nombreuses manifestations mécaniques des phénomènes de vieillissement ont été observées dans les alliages de zirconium et reportées par la littérature [Graff 06]. Les deux effets majeurs que l'on observe sur le comportement mécanique sont l'existence d'un plateau "athermique" (Fig. I.9(a)) et la diminution de la sensibilité de l'écoulement viscoplastique à la vitesse de déformation. Cette diminution notable de la sensibilité du matériau à la vitesse de déformation s'accompagne d'une augmentation du volume d'activation étant donné que l'un est inversement proportionnel à l'autre.



(a) [Thorpe 78c]



(b) [Thorpe 78a]

FIG. I.9 – (a) Evolution avec la température de la contrainte d'écoulement pour un alliage Zr-1%Nb et (b) de la vitesse de fluage secondaire pour du Zr-1%Nb pour une contrainte de 180 MPa.

Sous certaines conditions, des instabilités peuvent apparaître sous la forme de serrations dues à la fois à une alternance ancrage/désancrage des dislocations dans les nuages de Cottrell et à une inversion de signe du paramètre de sensibilité à la vitesse.

Dans les alliages de zirconium, l'effet le plus spectaculaire du vieillissement est observé sur le comportement en fluage. En effet, Thorpe [Thorpe 78a] montre que la vitesse de fluage stationnaire est diminuée de plus de deux décades sous l'effet de l'interaction entre l'oxygène et les dislocations (voir Fig. I.9(b)).

### I.6.2.2 Glissement dévié des dislocations

Le glissement dévié est un mécanisme fréquemment rencontré dans les matériaux cristallins [Jackson 83, Bonneville 79] et dans les alliages de zirconium [Ferrer 00, Geyer 99a, Priser 11]. Il permet aux dislocations de franchir des obstacles tels que des précipités par exemple. C'est d'ailleurs le principal moteur de déviation des dislocations dans les alliages de zirconium recristallisés sollicités en fluage [Rautenberg 09]. Dans les alliages de Zr, la déviation des dislocations s'opère des plans prismatiques vers les plans pyramidaux de première espèce. La déviation d'une dislocation est définie comme le changement d'un plan de glissement pour un autre ayant le même vecteur de Burgers. Cette spécificité fait que seules les dislocations vis peuvent dévier. La cission critique des plans pyramidaux n'étant que faiblement supérieure à la cission critique des plans prismatiques dans les alliages de zirconium, on pourrait penser que la déviation est un mécanisme actif pourvu que les systèmes de glissement soient favorablement orientés. En réalité, le fait que la plupart des dislocations vis présentent un étalement de cœur dans des plans de dissociation [Ferrer 00], rend la réalisation "spontanée" de ce processus difficile. Escaig et Bonneville [Bonneville 79, Bonneville 85] ont étudié en détail le mécanisme de glissement dévié dans le cuivre et notamment la dépendance de la déviation à la contrainte et à la température. Ils montrent que la cission dans le plan de déviation joue un rôle moteur dans l'activation du glissement dévié. Jackson [Jackson 83] a, quant à lui, étudié l'impact de ce mécanisme sur la plasticité des cristaux. Il met en avant le glissement dévié comme mécanisme d'écrouissage par la création de structure de dislocations.

### I.6.2.3 Montée des dislocations

La plupart des modèles polycristallins décrivent l'écoulement viscoplastique au travers de mécanismes de glissements cristallins. Pour la problématique qui nous concerne (fluage basse contrainte au voisinage de 400°C), nous verrons que cette hypothèse est pertinente puisque seuls des mécanismes de glissement ont été mis en évidence expérimentalement [Crépin 95]. Cependant, dès que l'on considère des températures plus élevées, les mécanismes diffusionnels s'activent et agissent sur la mobilité des dislocations. La montée d'une dislocation est un mouvement hors plan non conservatif, c'est-à-dire que le mouvement de la dislocation se fait perpendiculairement au plan de glissement et qu'il nécessite la diffusion de défauts ponctuels (lacune ou interstitiel) au cœur de la dislocation par diffusion à l'état solide. Du fait de sa géométrie, seules les dislocations coins sont concernées par la montée. L'activation de la montée est nécessairement thermiquement activée puisque les défauts ponctuels (DP) de types lacunaires ou interstitiels doivent migrer sur de longues distances afin de se condenser sur les dislocations

pour en provoquer leur montée. On comprend alors que si l'on augmente sensiblement la température, la mobilité des DP va elle aussi augmenter et le mécanisme de montée des dislocations pourra être activé. Lebensohn a introduit un terme de montée dans son modèle ViscoPlastic Self-Consistent (VPSC) [Lebensohn 10] et montre que ce mécanisme améliore les prédictions de son modèle lorsqu'il l'applique au comportement de l'olivine et à l'évolution de la texture d'un alliage d'aluminium à chaud - ce pour des vitesses de déformation faibles.

Même si les mécanismes de déformation sous irradiation des alliages de zirconium restent un sujet controversé en raison des difficultés associées aux observations expérimentales *in situ*, on peut penser que la montée va jouer un rôle décisif dans le comportement sous irradiation [Matthews 88]. En effet, sous l'impact des chocs ballistiques entre les neutrons et les atomes, la microstructure d'un alliage de zirconium évolue profondément au cours de son irradiation en réacteur et les propriétés mécaniques du matériau s'en retrouvent modifiées. En réacteur, on assiste à des phénomènes de croissance libre ou encore de fluage sous irradiation qui accroissent considérablement la cinétique de déformation des alliages. L'irradiation produit des défauts ponctuels en grand nombre au point de rendre thermodynamiquement instable le matériau compte tenu de l'augmentation très élevée de son énergie interne. Parmi ces défauts, un certain nombre s'agglomèrent sur les plans prismatiques pour former des boucles de dislocations  $\langle a \rangle$  (à la fois de type lacunaire et interstitielle). La principale conséquence de ces boucles est de durcir le matériau en ajoutant des obstacles sur les plans prismatiques empêchant ainsi le glissement sur ces plans. Certains auteurs proposent que les défauts ponctuels libres de migrer vont se condenser de façon biaisée sur les puits de la microstructure [Mansur 79, Woo 88, Woo 93, Woo 00], principalement les dislocations, ayant pour effet d'activer le mécanisme de montée qui était inopérant hors flux.

L'irradiation d'un matériau métallique a pour conséquence d'augmenter considérablement la concentration en DP au sein de la matrice, et donc de diminuer la distance de migration moyenne d'élimination des DP sur les puits. Si l'on considère cette distance critique d'absorption du même ordre de grandeur que la distance interatomique, alors la condensation des DP par les dislocations pourra se produire sous le seul effet de l'agitation thermique. Par conséquent, le mécanisme de montée devrait être actif dès les basses températures dans une matrice sursaturée en DP. Cette analyse est cohérente avec les mesures expérimentales des énergies d'activation très faibles du fluage sous irradiation dans la mesure où l'on considère que la montée des dislocations est un des mécanismes potentiels pouvant expliquer une part importante de la déformation sous flux. Pour finir, une discussion sera engagée dans le chapitre V de ce manuscrit afin de fournir les premiers éléments d'une modélisation micromécanique de ces phénomènes de déformation sous irradiation.

## I.7 Changement d'échelle dans les polycristaux

Le comportement mécanique d'une structure sous charge résulte non seulement du comportement de ses constituants élémentaires mais également de leur interaction mécanique. Afin de rendre compte de la réponse mécanique d'un polycristal soumis à une sollicitation macroscopique, on ne peut pas se contenter d'une simple opération de moyenne car il faut prendre en compte les incompatibilités de déformation entre grains, ainsi que l'équilibre mécanique du milieu continu. L'objectif des méthodes d'homogénéisation est de parvenir à décrire le comportement d'un Volume Élémentaire Représentatif (VER) du polycristal en intégrant des informations sur la microstructure (forme des grains, FDOC,...) et sur les mécanismes de déformation actifs à l'échelle du grain. La transition d'échelle implicite qui s'opère entre les champs microscopiques et macroscopiques lorsqu'on sollicite un polycristal constitue une étape essentielle dans la prédiction du comportement effectif qu'il est nécessaire d'explicitier dans le cadre d'une modélisation micromécanique.

L'homogénéisation est un domaine bien compris pour les comportements linéaires. On sait par exemple estimer les propriétés élastiques effectives d'un polycristal à partir des propriétés élastiques du monocristal en adoptant un schéma auto-cohérent [Kerner 56, Bui 69]. En revanche, pour les comportements non linéaires, la résolution du problème est plus délicate. La forme de la loi de comportement est en général inconnue, l'histoire de chargement intervient et le principe de superposition ne fonctionne plus. Il n'existe pas de solution rigoureuse en élastoviscoplasticité d'où l'existence d'un grand nombre de formulations dans ce domaine.

Taylor [Taylor 38] en supposant une déformation plastique uniforme dans le polycristal, propose une première formulation de la règle de localisation dans un polycristal. La compatibilité de déformation entre grains est alors assurée mais l'équilibre des contraintes n'est pas respecté. Son hypothèse conduit à une borne supérieure du potentiel macroscopique et donc à une réponse mécanique trop raide des phases. Le pendant de ce modèle est le modèle statique où la contrainte est supposée uniforme qui fournit une estimation de la borne inférieure et conduit au critère de Tresca pour un polycristal rigide-plastique. Finalement, on voit qu'une hypothèse d'homogénéité des contraintes ou des déformations dans un polycristal conduit à des réponses mécaniques respectivement trop raides et trop souples des phases cristallines présentes dans le polycristal. Sachs publie en 1928 [Sachs 28] un modèle à contrainte proportionnelle qui ne fournit pas de bornes mais qui est fréquemment employé pour les polycristaux. En 1951, Bishop et Hill [Bishop 51] propose une extension du modèle de Hill qui correspond à une situation de glissement multiple sur 5 systèmes de glissement indépendants. Ils appliquent leur modèle à un polycristal cubique à face centrée (CFC) parfaitement plastique et obtiennent en particulier en traction uniaxiale le rapport entre la contrainte d'écoulement  $\Sigma_0$  du polycristal et la cission critique  $\tau_0$  nécessaire pour activer un système de glissement  $\Sigma_0/\tau_0 = 3,067$ . Lin propose en 1957 [Lin 57] un modèle où il considère la déformation uniforme. En considérant une partition élastique/plastique de la déformation, on peut

écrire cette uniformité au travers de la relation I.11 :

$$\underline{\underline{E}}^p + \underline{\underline{E}}^e = \underline{\underline{\varepsilon}}_\varphi^p + \underline{\underline{\varepsilon}}_\varphi^e \quad (\text{I.11})$$

où  $\underline{\underline{\varepsilon}}_\varphi^e$  et  $\underline{\underline{\varepsilon}}_\varphi^p$  sont les tenseurs des parties élastique et plastique de la déformation dans la phase  $\varphi$ .

En supposant une élasticité isotrope et homogène ( $\tilde{\mathbb{C}} = \langle \mathbb{C} \rangle_G = \mathbb{C}$ ), on décompose le tenseur d'élasticité  $\mathbb{C}$  sur la base des projecteurs sphérique ( $\mathbb{K}$ ) et déviatorique ( $\mathbb{J}$ ) en introduisant les modules de compressibilité ( $k$ ) et de cisaillement ( $\mu$ ) du polycristal. On peut alors écrire :

$$\mathbb{C} = 3k\mathbb{K} + 2\mu\mathbb{J} \quad (\text{I.12})$$

Si bien que l'équation I.11, dans le cas où la plasticité est isochore, peut se réécrire :

$$\underline{\underline{\sigma}}_\varphi = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu \left( \underline{\underline{E}}^p - \underline{\underline{\varepsilon}}_\varphi^p \right) \quad (\text{I.13})$$

On aboutit alors à une expression explicite de la règle de localisation dans l'hypothèse d'une élasticité isotrope et d'une déformation uniforme dans le polycristal qui correspond au modèle de Lin.

Afin de satisfaire les conditions d'équilibre sur les champs de contrainte et la compatibilité des déformations entre grains, Kröner propose en 1961 un modèle auto-cohérent dans le but de mieux décrire l'hétérogénéité intergranulaire. Pour construire son modèle, il s'appuie sur la solution du problème d'Eshelby [Eshelby 57] relatif à une inclusion uniformément plastifiée dans une matrice élastique isotrope infinie sollicitée à l'infini par un chargement uniforme. Il aboutit à l'expression I.14 de la contrainte moyenne dans la phase  $\varphi$  qui dépend du module de cisaillement et du coefficient de Poisson et qui permet de prendre en compte explicitement la forme des grains au travers du tenseur d'Eshelby (voir Annexe A pour le calcul du tenseur d'Eshelby). Weng propose en 1980 une extension de ce modèle en l'appliquant au cas viscoplastique [Weng 81].

$$\underline{\underline{\sigma}}_\varphi = \underline{\underline{\Sigma}} + \mathbb{C} (\mathbb{I} - \mathbb{S}^E) (\underline{\underline{E}}^p - \underline{\underline{\varepsilon}}_\varphi^p) \quad (\text{I.14})$$

En 1965, Hill publie son modèle incrémental [Hill 65] dans lequel il relie les incréments de déformation et de contrainte par une loi de comportement linéaire en affectant les modules par phase à leur valeur estimée pour la déformation moyenne ou la contrainte moyenne. Du fait de l'hétérogénéité intraphase, on sait maintenant notamment avec les travaux de Ponte-Castañeda [Ponte-Castañeda 92], que la réalité est plus complexe encore et qu'il est préférable d'estimer les modules pour une valeur reliée au moment d'ordre 2 afin de mieux rendre compte de cette hétérogénéité intraphase. La mise en œuvre du modèle de Hill reste assez lourde et délicate sauf dans le cas particulier des chargements radiaux monotones et d'un comportement isotrope pour lesquels Zaoui et Berveiller [Zaoui 72, Berveiller 79] proposent une forme intégrée en se fondant sur une

linéarisation sécante des modules par phase.

Finalement, l'ensemble des modèles présentés jusqu'ici peuvent se mettre sous une forme analogue à celle obtenue par Lin (Eq. I.13) [Zaoui 90].

$$\underline{\underline{\sigma}}_{\varphi} = \underline{\underline{\Sigma}} + \eta\mu \left( \underline{\underline{E}}^p - \underline{\underline{\varepsilon}}_{\varphi}^p \right) \quad (\text{I.15})$$

Où l'on a :

- Pour le modèle de Sachs,  $\eta = 0$
- Pour le modèle de Lin,  $\eta = 2$
- Pour le modèle de Taylor,  $\eta = +\infty$
- Pour le modèle de Kröner,  $\eta = 2(1 - \beta_E)$  avec  $\beta_E = 2(4 - \nu)/15(1 - \nu)$
- Pour le modèle de Berveiller et Zaoui,  $\eta = 2\alpha(1 - \beta_E)$  avec  $\frac{1}{\alpha} \simeq 1 + \frac{3}{2}\mu \frac{\|\underline{\underline{E}}^p\|}{J_2(\underline{\underline{\Sigma}})}$

Dans le modèle de Berveiller et Zaoui, la fonction  $\alpha$  décrit, de façon approchée, l'accommodation isotrope des incompatibilités de déformation par la matrice lors de l'écoulement plastique. Pour les faibles niveaux de déformation plastique, la fonction  $\alpha$  est proche de 1 et on retrouve le modèle de Kröner pour lequel l'accommodation est élastique. Ce cas correspond à une situation où seuls quelques grains favorablement orientés par rapport à la sollicitation plastifient, les autres grains se déformant élastiquement. En revanche, pour des niveaux de déformation plastique important, la fonction  $\alpha$  tend vers 0. Le modèle de Berveiller et Zaoui se rapproche alors du modèle statique en contrainte homogène, situation pour laquelle tous les grains du polycristal plastifient.

Dans les années 90, Pilvin et Cailletaud [Pilvin 90, Cailletaud 94] proposent une approche plus pragmatique de l'homogénéisation des polycristaux élastoviscoplastique. En s'inspirant des travaux de Berveiller et Zaoui pour décrire l'interaction élasto-plastique entre les phases en inclusion et le MHE, ils formulent une règle de localisation heuristique applicable pour des textures quelconques et à des trajets de chargement complexes. Dans cette règle dite "règle en  $\beta$ ", l'estimation de la contrainte moyenne par phase résultant de l'incompatibilité de déformation entre les phases et le MHE est régie par une variable interne qui évolue au cours de l'écoulement plastique. De nouveau, la règle de localisation en  $\beta$  prend une forme analogue à l'expression générale I.15 et s'écrit de la manière suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}}_{\varphi} = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu(1 - \beta_E)(\underline{\underline{B}} - \underline{\underline{\beta}}_{\varphi}) \quad (\text{I.16})$$

$$\text{avec } \underline{\underline{B}} = \sum_{\varphi \in G} f_{\varphi} \underline{\underline{\beta}}_{\varphi} \quad (\text{I.17})$$

La loi d'évolution de la variable  $\underline{\underline{\beta}}$  est inspirée des lois phénoménologiques permettant de décrire l'écrouissage cinématique non linéaire [Chaboche 85, Delobelle 90] comme l'a montré Onimus [Onimus 03].

$$\dot{\underline{\beta}}_{\varphi} = \dot{\underline{\varepsilon}}_{\varphi}^p - D(\underline{\beta}_{\varphi} - \delta \underline{\varepsilon}_{\varphi}^p) \|\dot{\underline{\varepsilon}}_{\varphi}^p\| \quad (\text{I.18})$$

Dans cette équation I.18, deux paramètres ajustables,  $D$  et  $\delta$ , sont introduits donnant ainsi une certaine flexibilité au modèle. Pour assurer l'autocohérence du modèle, ces deux paramètres doivent être ajustés pour réduire au maximum l'écart entre les champs mécaniques moyens par phase simulés par le modèle en  $\underline{\beta}$  et une référence. Cette référence peut être obtenue à l'aide d'un modèle existant ou mieux, par des calculs éléments finis modélisant les interactions non linéaires entre chaque phase et le MHE [Pilvin 97] ou bien encore par des calculs EF d'agrégats [Gérard 08]. Dans cette étude, nous avons choisi de développer une méthode d'estimation statistique des champs mécaniques moyens par phase afin d'estimer l'influence de l'anisotropie sur la règle de transition d'échelle en mettant en œuvre des calculs d'agrégats polycristallins.

## I.8 Démarche de l'étude

Les objectifs de ces travaux de recherches sont multiples. Globalement, il s'agit de montrer quel est l'apport d'une modélisation micromécanique dans le cadre d'une activité industrielle et comment elle peut aboutir à une meilleure compréhension des phénomènes responsables du comportement thermomécanique non linéaire des alliages de zirconium. Un des objectifs est également de proposer une démarche de modélisation simplifiée fondée sur une description phénoménologique issue des résultats obtenus par le biais de la modélisation micromécanique.

Les résultats obtenus au cours des travaux de thèse de Grosjean [Grosjean 09], qui avaient pour but de caractériser expérimentalement l'anisotropie de comportement en fluage à 400°C de différents alliages de zirconium, vont être largement utilisés dans cette étude. Nous souhaitons analyser et mieux comprendre les résultats expérimentaux obtenus lors de cette étude à la lumière des modèles de comportement que nous allons développer dans ces travaux.

Afin d'apporter quelques éléments de réponse aux nombreuses interrogations soulevées par la volonté de décrire le comportement mécanique d'un polycristal à partir des mécanismes élémentaires de déformation de ses constituants, deux pistes vont être investiguées dans cette étude :

- La première investigation consiste à remettre en question la loi d'écoulement viscoplastique utilisée dans le modèle pour décrire le comportement du monocristal. Des analyses en Microscopie Electronique en Transmission (MET) ont été réalisées par Rautenberg sur des échantillons sollicités en fluage basse contrainte à 400°C dans différentes directions de chargement. Les résultats de cette étude quantitative sont interprétés en terme de mécanismes de déformation. L'introduction de ces mécanismes, dans une approche micromécanique, doit permettre une bonne description de l'anisotropie de comportement en fluage mesurée par Grosjean.

Bien souvent, les modèles polycristallins surestiment l'activation des systèmes de glissement secondaire pour fournir une bonne description du comportement macroscopique. Notre souhait est de développer une modélisation polycristalline fondée sur les mécanismes observés expérimentalement et qui permette de reproduire les observations expérimentales.

- La seconde investigation concerne le changement d'échelle utilisé dans la règle en  $\beta$ . Comme on l'a vu, cette règle a initialement été développée pour des polycristaux cubiques sans texture marquée. La question que l'on se pose est de savoir si la règle en  $\beta$  est toujours valide pour un polycristal hexagonal fortement texturé avec uniquement trois systèmes de glissement principaux. Pour apporter des éléments de réponses à cette interrogation, nous proposons une stratégie d'estimation statistique des champs mécaniques d'une phase cristallographique plongée dans un Milieu Homogène Equivalent en utilisant des calculs EF d'agrégats en champs complets. Nous montrons que cet estimateur statistique du comportement permet de construire pour certaines orientations cristallines une solution de référence en élastoviscoplasticité qui peut être confrontée aux solutions fournies par des règles de changement d'échelle explicites. La construction de cette base de résultats numériques doit nous permettre de valider l'approche en  $\beta$  ou bien de la modifier le cas échéant.





# Chapitre II

---

## Caractérisation expérimentale du comportement viscoplastique du Zircaloy-4 recristallisé

---

### II.1 Introduction

Dans notre société industrialisée, les matériaux sont au cœur du processus d'innovation technologique. La caractérisation expérimentale du comportement des matériaux constitue une étape essentielle dans le processus d'intégration en tant que produit industriel. Dans le domaine du nucléaire, les premiers développements de l'alliage M5<sup>®</sup> ont débuté dans les années 1990, et les premières utilisations en réacteur n'ont eu lieu qu'une quinzaine d'années plus tard. Le développement d'un nouvel alliage est donc un processus progressif qui nécessite de très nombreuses investigations expérimentales.

On pourra toujours développer des modèles de comportement aussi fins que l'on souhaite, la réalité physique sous-jacente qui intervient à l'échelle la plus fine du matériau aura, de toute évidence, des difficultés à être captée dans son intégralité. On se trouve donc face à un problème où des hypothèses simplificatrices devront être faites en terme de modélisation. Face à ce constat, le matériau quant à lui ne fait pas d'hypothèse, on le sollicite et il réagit de manière déterministe en fonction des conditions opératoires aux phénomènes de dispersion expérimentale près.

Dans cette étude, nous nous sommes intéressés à caractériser le comportement élastoviscoplastique de deux alliages de zirconium recristallisés : le M5<sup>®</sup> et le Zy-4. Nous nous focalisons dans ce manuscrit sur les résultats obtenus sur l'alliage Zy-4 et souhaitons les analyser à la lumière d'un formalisme micromécanique. Nous détaillons, dans

une première partie, les résultats des campagnes d'essais de fluage multiaxés à 400°C qui ont été entrepris dans le cadre de la thèse de Grosjean [Grosjean 09]. Puis, nous présentons les résultats obtenus pour des essais de traction uniaxiale avec des phases de relaxation entre 280°C et 430°C.

### II.2 Présentation du produit étudié

Le produit étudié dans ce travail est un tube guide en alliage de zirconium recristallisé (Zy-4) dans lequel ont été prélevés des tronçons de 120mm pour les éprouvettes. La taille de grain moyenne est voisine de  $5\mu\text{m}$  comme on peut l'observer sur les clichés EBSD et MET présentés sur la figure II.1. La composition chimique de cet alliage est celle décrite dans le tableau I.1. La microstructure est constituée de nombreux précipités sous la forme de phases de Laves riches en fer, chrome et étain. L'oxygène est principalement présent en solution solide dans la matrice en zirconium. Cet alliage est le matériau constitutif d'un tube guide d'un assemblage combustible.

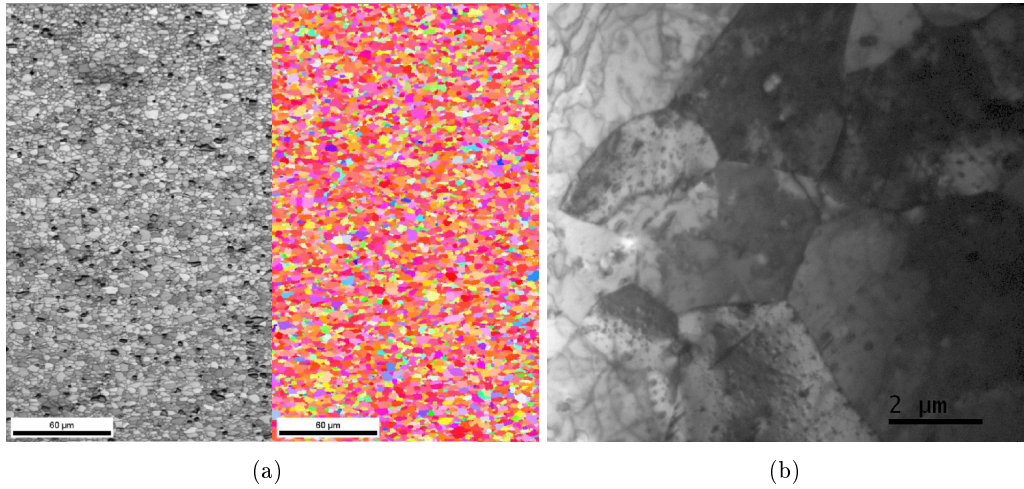


FIG. II.1 – Micrographies (a) EBSD et (b) MET du produit étudié [Rautenberg 09].

### II.3 Comportement en fluage biaxial

En service, l'évolution dimensionnelle des assemblages combustibles est principalement pilotée par des phénomènes de fluage qu'il est nécessaire de maîtriser. L'anisotropie de comportement viscoplastique rend la tâche de caractérisation expérimentale fastidieuse car il ne suffit pas de caractériser une direction de chargement pour connaître le comportement du matériau dans toutes les directions de sollicitation. Il faut, à cause de cette anisotropie, balayer un ensemble de directions pour être en mesure de propo-

## II.3 Comportement en fluage biaxial

---

ser une caractérisation de l'anisotropie de comportement. Notons que l'ensemble des données discutées dans cette partie ont été obtenues à 400°C.

### II.3.1 Dispositif expérimental

Le banc de fluage multiaxé présenté dans ce paragraphe a entièrement été développé dans le cadre de la thèse de Grosjean [Grosjean 09] au CIRIMAT à Toulouse. Ce dispositif expérimental spécifique permet de caractériser l'anisotropie de comportement en fluage thermique. Le chauffage des éprouvettes et le maintien en température sont assurés par un four radiatif (voir Fig. II.2(a)) contenant 6 lampes halogènes de 300W chacune dont la puissance est régulée par le thermocouple central soudé sur la zone de mesure des déformations. La mise en place d'un état de contrainte multiaxial dans le tube est contrôlée par deux systèmes indépendants : une ligne de traction/compression et un système de pressurisation.

La pression interne combinée à un effort de traction imposé conduit à un état triaxial des contraintes. Cependant, en faisant l'hypothèse d'un tube à paroi mince, on peut négliger la composante radiale et réduire l'état de contrainte à ses composantes ortho-radiale et circonférentielle. Pour un tube sous pression, on définit la biaxialité d'un chargement mécanique par le rapport  $\beta$  :

$$\beta = \frac{\Sigma_{zz}}{\Sigma_{\theta\theta}} \quad (\text{II.1})$$



FIG. II.2 – Dispositif CAT-0 (Creep Advanced Testing) du CIRIMAT : (a) Four radiatif et (b) ombroscopie laser.

Une analyse en statique sur un tube à paroi mince soumis un effort axial  $F$  et/ou à une pression interne  $p$  permet d'approximer l'état de contrainte moyen au sein du matériau par le biais des relations II.2.

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \begin{pmatrix} \Sigma_{rr} & 0 & 0 \\ 0 & \Sigma_{\theta\theta} & 0 \\ 0 & 0 & \Sigma_{zz} \end{pmatrix}_{(\underline{e}_r, \underline{e}_\theta, \underline{e}_z)} \quad \text{avec :} \quad \begin{cases} \Sigma_{rr} \approx -p/2 \\ \Sigma_{\theta\theta} \approx \frac{p}{2} \left( \frac{\phi_m}{e} - 1 \right) \\ \Sigma_{zz} \approx \frac{\Sigma_{\theta\theta}}{2} + \frac{F}{S_0} \end{cases} \quad (\text{II.2})$$

où  $e$  est l'épaisseur du tube,  $\phi_m$  le diamètre moyen et  $S_0 = \pi e \phi_m$  l'aire de la section droite du tube.

Le principe de mesure des déformations est fondé sur la technique de l'ombroscopie laser (voir Fig. II.2(b)). Le four dispose de fenêtres en pyrex permettant à l'information optique de circuler à travers le four. On réalise deux mesures de déformation dans le but de quantifier l'anisotropie de comportement : une mesure du diamètre et une mesure de la longueur. L'évolution du diamètre est directement portée par la matière (capteur Eulerien) alors que l'évolution de la déformation axiale est mesurée au travers de l'écartement entre deux drapeaux soudés sur la zone utile (capteur Lagrangien).

### II.3.2 Données expérimentales

La mesure de la vitesse de fluage stationnaire en stade II pour de nombreux trajets de chargement biaxés constitue le résultat le plus remarquable de cette campagne expérimentale [Grosjean 09]. En effet, face à la complexité des moyens à mettre en œuvre pour caractériser l'anisotropie de comportement en viscoplasticité, très peu de résultats ont été publiés dans la littérature. A la difficulté des trajets de chargement complexes s'ajoute les problèmes liés à la température. D'après Chaboche [Chaboche 85], *“les quelques résultats d'expériences en traction-torsion-pression interne sur des éprouvettes tubulaires [...] montrent qu'en chargement radial, les notions de contrainte équivalente et de déformation équivalente au sens du critère de von Mises peuvent être utilisées pour définir, dans l'espace des contraintes, les surfaces isovitesse de déformation”*.

On définit alors la vitesse de fluage équivalente en stade II au sens de von Mises à partir de l'intensité de l'écoulement viscoplastique mesurée en régime stationnaire dans les directions axiale et circonférentielle selon l'expression II.3 en considérant la plasticité incompressible ( $tr(\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{II}) = 0$ ).

$$\dot{\epsilon}_{eq}^{II} = \sqrt{\frac{2}{3} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{II} : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{II}} = \frac{2}{\sqrt{3}} \sqrt{\dot{\epsilon}_{zz}^{II^2} + \dot{\epsilon}_{\theta\theta}^{II^2} + \dot{\epsilon}_{zz}^{II} \dot{\epsilon}_{\theta\theta}^{II}} \quad (\text{II.3})$$

#### II.3.2.1 Stationnarité de l'écoulement viscoplastique en stade II

Pour optimiser l'utilisation du dispositif d'essais, ceux-ci ne sont pas conduits jusqu'à rupture. Afin de montrer que le dispositif permet d'atteindre un régime stationnaire de l'écoulement viscoplastique, nous avons mis en place une procédure permettant d'estimer les dérivées première et seconde par rapport au temps des déformations axiale et circonférentielle (vitesse et accélération de déformation). Le critère est le suivant, on

décète que l'on est en régime stationnaire lorsque l'accélération de déformation équivalente est inférieure à  $8.10^{-10}s^{-2}$ . On peut voir un exemple d'estimation de cette vitesse stationnaire sur les figures II.3.

### II.3.2.2 Surfaces isovitesse

L'ensemble des données acquies en fluage à 400°C sur un alliage Zy-4 recristallisé est présenté de façon synthétique sur la figure II.4(a). Les données expérimentales sont représentées dans le plan  $(\Sigma_{\theta\theta}, \Sigma_{zz})$ . Les coordonnées de chaque point correspondent à l'état de contrainte imposé au cours de l'essai de fluage correspondant. On associe à ce point un vecteur d'écoulement stationnaire  $\underline{\dot{\epsilon}}_{II}$ . La surface isovitesse correspond au lieu des points dans l'espace des contraintes où la vitesse de fluage stationnaire équivalente définie par l'équation II.3 est constante. Le vecteur d'écoulement se décompose en une composante axiale et une composante orthoradiale selon l'expression II.4.

$$\underline{\dot{\epsilon}}_{II} = \dot{\epsilon}_{\theta\theta}^{II} \underline{e}_{\theta} + \dot{\epsilon}_{zz}^{II} \underline{e}_z \quad (\text{II.4})$$

Afin de représenter le vecteur d'écoulement stationnaire homogène à l'inverse d'un temps dans un espace de contraintes, on est amené à définir une grandeur  $\eta$  homogène à une viscosité (en MPa.s). Ainsi on construit le vecteur contrainte  $\underline{\Sigma}^N$  représentatif du vecteur d'écoulement stationnaire à partir de la relation II.5.

$$\underline{\Sigma}^N = \begin{pmatrix} \Sigma_{\theta\theta}^N \\ \Sigma_{zz}^N \end{pmatrix}_{(\underline{e}_{\theta}, \underline{e}_z)} = \begin{pmatrix} \Sigma_{\theta\theta} \\ \Sigma_{zz} \end{pmatrix}_{(\underline{e}_{\theta}, \underline{e}_z)} + \eta \underline{\dot{\epsilon}}_{II} \quad (\text{II.5})$$

On rajoute sur la figure II.4(a) des courbes de tendances représentant le lieu des points le long desquelles la vitesse de fluage stationnaire équivalente est constante et on construit ainsi les surfaces isovitesse sur la base de données expérimentales. On observe que les vecteurs d'écoulement  $\underline{\dot{\epsilon}}_{II}$  sont globalement normaux aux surfaces isovitesse, ce qui traduit que l'écoulement dérive d'un potentiel viscoplastique  $\Omega$  et que la loi de comportement du matériau doit pouvoir se mettre sous la forme II.6 comme l'a montré Rice [Rice 71].

$$\underline{\dot{\epsilon}}^{\text{vp}} = \frac{\partial \Omega}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \quad (\text{II.6})$$

Sur le graphique de la figure II.4(b), on compare alors les isovitesse expérimentales obtenues à 400°C pour un alliage Zy-4 recristallisé aux surfaces simulées par le critère de von Mises en imposant conventionnellement une limite d'écoulement identique en traction uniaxiale suivant  $z$ . Ces courbes mettent en évidence une anisotropie de comportement en fluage très marquée. En particulier, on remarque un écart important à l'isotropie pour l'ensemble des directions de chargement. On peut déduire de cette comparaison à un critère isotrope que la réponse du Zy-4 recristallisé à 400°C en fluage biaxé est bien plus raide que pour un chargement uniaxial suivant  $z$  par rapport à une configuration isotrope. Si on avait pris la convention d'imposer des limites d'écoulement

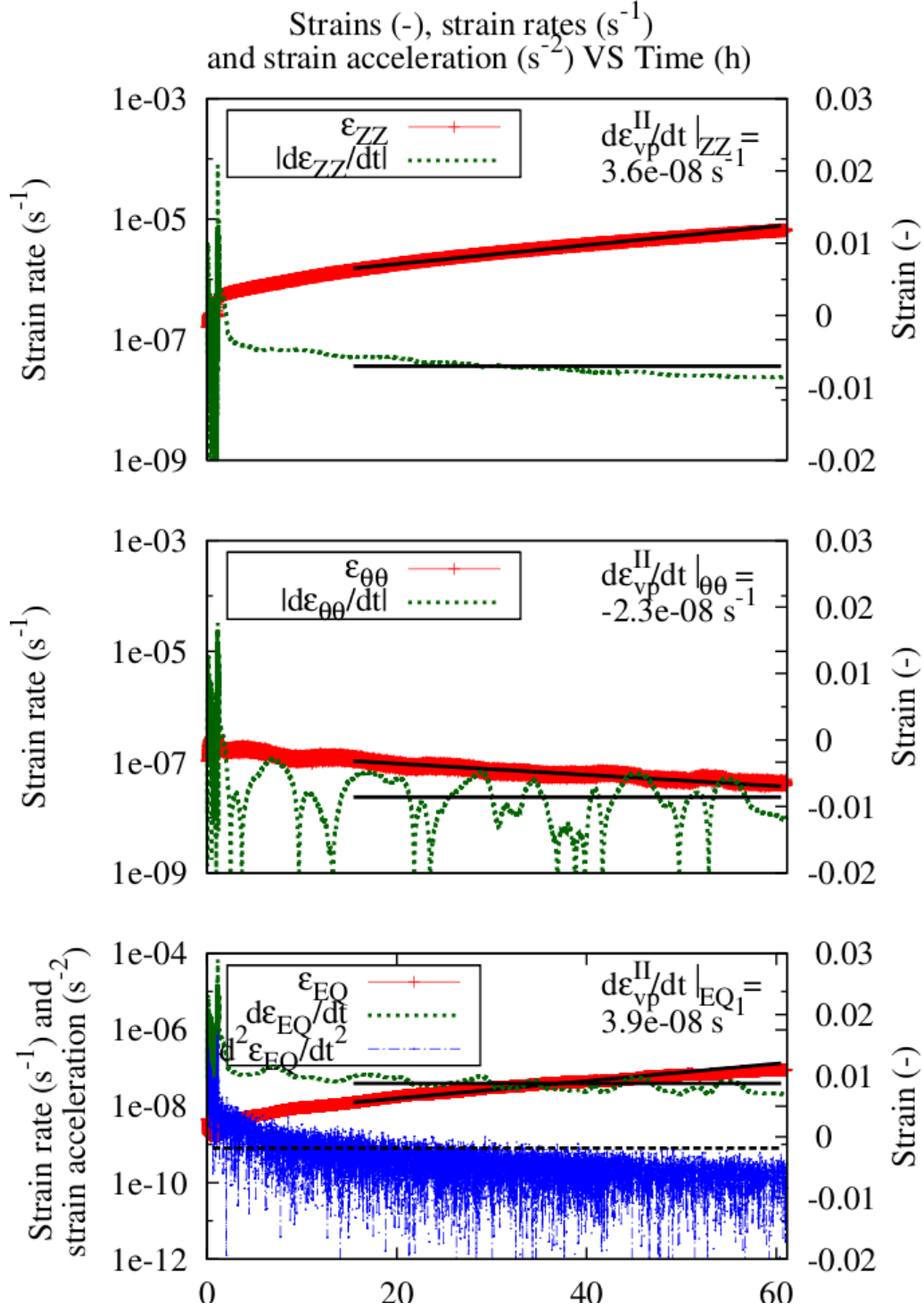


FIG. II.3 – Exemple d'estimation de la vitesse de fluage stationnaire équivalente sur un essai de fluage uniaxé à  $\Sigma_{zz} = 100\text{MPa}$  pour un alliage Zy-4 recristallisé à  $400^\circ\text{C}$ . Le critère de stationnarité est fixé à  $\dot{\epsilon}_{eq}^{II} < 8.10^{-10}s^{-2}$ .

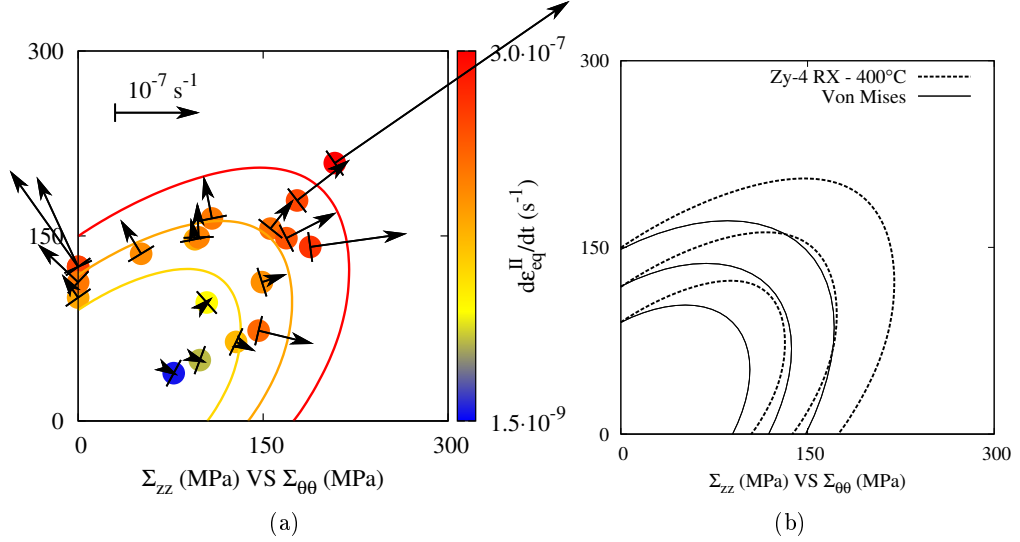


FIG. II.4 – (a) Synthèse des résultats obtenus en fluage à 400°C sur du Zy-4 recristallisé : (a) état de contrainte, vecteur d'écoulement stationnaire et courbes isovitesse de tendance (Les vecteurs d'écoulement sont tracés pour une "viscosité"  $\eta = 6,6 \cdot 10^{+8} \text{MPa.s}$ ) et (b) comparaison des surfaces isovitesse au critère de von Mises.

identiques en traction circonférentielle, on aurait trouvé le pendant de ce résultat, à savoir des écarts importants à l'isotropie mais cette fois-ci dans le sens d'un comportement plus souple.

### II.3.3 Mécanismes de déformation

Des analyses de ces essais de fluage ont été entrepris en Microscopie Electronique en Transmission (MET) afin de retenir les mécanismes de déformation majoritairement observés dans une modélisation micromécanique qui sera détaillée dans le chapitre IV. Cette étude a été réalisée dans le cadre de la thèse de Rautenberg [Rautenberg 09] et a fait l'objet d'une publication dans [Priser 11]. Afin de retirer une information statistique pertinente de cette analyse, de nombreux grains (voir Fig.II.5(a)) sont observés afin d'être représentatif de la texture et du comportement mécanique moyen.

Il ressort de cette étude que le glissement prismatique reste le mécanisme de déformation majoritairement observé dans les alliages de zirconium recristallisés sollicités en fluage à 400°C (voir Fig.II.6(a)) pour des vitesses de déformation comprises entre  $10^{-9} \text{s}^{-1}$  et  $10^{-6} \text{s}^{-1}$ . Le glissement dévié des dislocations vis des plans prismatiques vers les plans pyramidaux de première espèce est également fréquemment observé (voir Fig.II.6(b)) comme mécanisme de franchissement des obstacles à courte distance comme les précipités par exemple. On note de plus une activité non négligeable des systèmes de glissement  $\pi_1 \langle a \rangle$ . Pour terminer, aucune dislocation  $\langle c+a \rangle$  n'a été observée : pour les sollicitations étudiées, les cristaux ne disposent donc d'aucun mécanisme de défor-



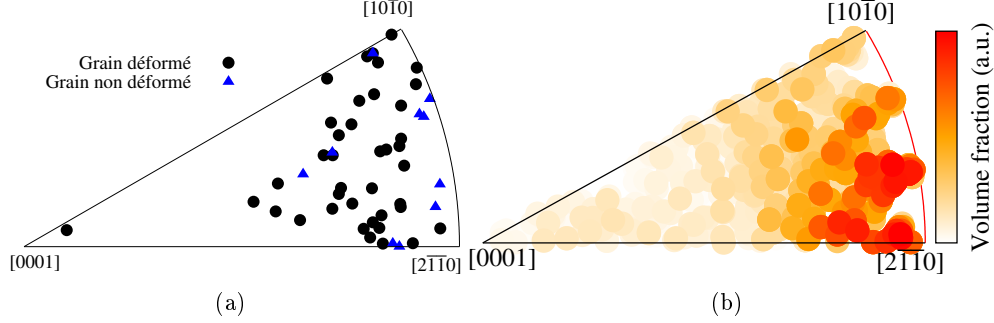


FIG. II.5 – (a) Projection dans le triangle standard de l'ensemble des grains observés sur un échantillon sollicité en fluage uniaxe et (b) texture d'un alliage Zy-4 recristallisé.

mation plastique permettant d'accommoder les déformations suivant la direction  $c$  du cristal.

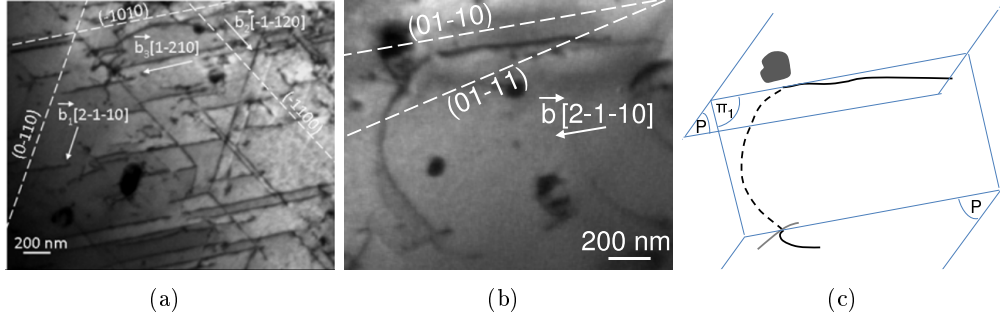


FIG. II.6 – Micrographies MET *post-mortem* obtenues pour un alliage Zy-4 recristallisé sollicité en fluage uniaxe ( $\Sigma_{zz} = 100\text{MPa}$ ) à  $400^\circ\text{C}$  pour un niveau de déformation plastique :  $\varepsilon_{\theta\theta}^{vp} = -0,54\%$  et  $\varepsilon_{zz}^{vp} = 0,92\%$ . (a) Observation de l'activation de 3 systèmes primastiques et (b) d'un mécanisme de double glissement dévié permettant le franchissement d'un précipité.

Les données tracées sur la figure II.7 sont relatives à l'analyse d'un échantillon sollicité en fluage uniaxial dont deux clichés MET sont donnés sur les figures II.6(a) et II.6(b) et confirment effectivement ces résultats. On note que environ 20% des grains observés sont non déformés\*. Dans le but de détecter une possible localisation des grains non déformés dans le triangle standard, on distingue sur la projection inverse II.5(a) les grains déformés de ceux non déformés. Il semble difficile de conclure sur ce point à cause du faible nombre de grains (pour le statisticien, pas pour l'expérimentateur!).

---

\*Un grain est déclaré déformé plastiquement lorsque au moins trois dislocations sont observées sur un même plan de glissement.

### II.3 Comportement en fluage biaxial

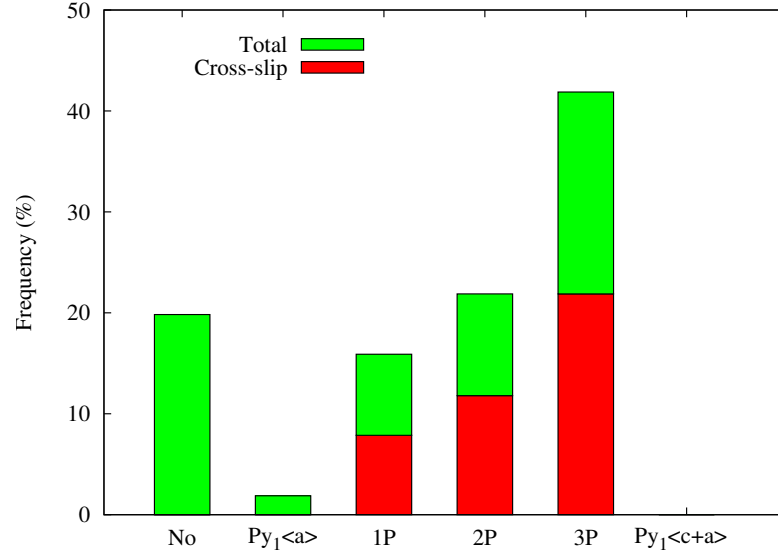


FIG. II.7 – Analyse statistique quantitative des observations MET *post-mortem* réalisées sur un échantillon en Zy-4 recristallisé sollicité en fluage uniaxial ( $\beta = +\infty$ ,  $\Sigma_{zz} = 100\text{MPa}$  et  $T = 400^\circ\text{C}$ ).

#### II.3.4 Facteurs de Schmid en traction uniaxiale

Les facteurs de Schmid constituent un moyen commode pour discuter plus précisément du rôle de l'orientation d'un grain sur l'activation des systèmes de glissement sans référence à la sollicitation. Il s'agit d'un critère purement géométrique qui permet, dans le cas d'une sollicitation uniaxiale, d'estimer le cisaillement maximum  $\tau^S$  sur un système de glissement  $S$  donné, produit par l'application d'une contrainte  $\Sigma$ . Par définition, le facteur de Schmid d'une famille de systèmes  $S$  s'exprime comme le rapport entre la cission résolue maximum et la contrainte appliquée :

$$F^S = \frac{\max_{s \in S} |\tau^{(s)}|}{|\Sigma|} \quad (\text{II.7})$$

Nous pouvons alors utiliser cette définition pour établir une cartographie des iso-valeurs des facteurs de Schmid pour les différents systèmes de glissement des alliages hexagonaux dans le triangle standard. Pour cela, on calcule ces facteurs pour toutes les phases d'une texture isotrope contenant un nombre très important de phases cristallographiques. Nous obtenons les figures II.8 qui nous permettront par la suite d'analyser le comportement du polycristal vis-à-vis du glissement prismatique et du glissement dévié sur les plans  $\pi_1<a>$ .

#### II.3.5 Facteurs de Schmid sous chargement multiaxial

On souhaite étendre la notion de facteur de Schmid établie pour des chargements uniaxiaux (voir Eq. II.7) à des trajets de chargement radiaux représentatifs des essais

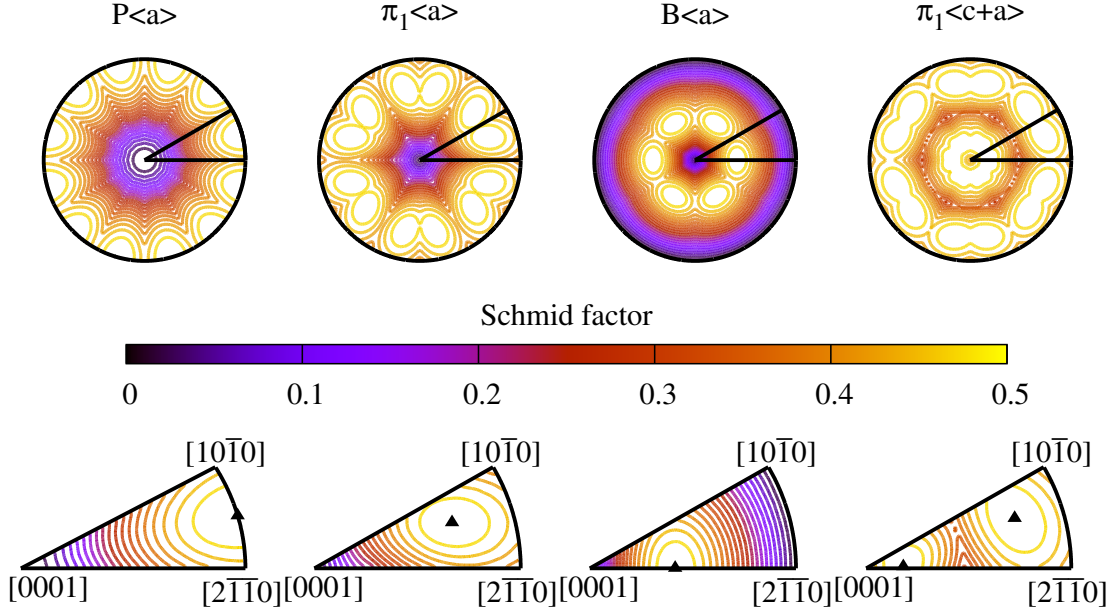


FIG. II.8 – Cartographie des isovaleurs des facteurs de Schmid des systèmes de glissement des alliages hexagonaux.

de fluage multiaxiaux. En reprenant la stratégie adoptée par Onimus [Onimus 03] pour le cas  $\beta = 1/2$ , on cherche  $F^S(\beta)$  tel que :

$$\tau^S = F^S(\beta)\Sigma^* \quad (\text{II.8})$$

où  $\Sigma^*$  est une contrainte équivalente à définir.

On considère un trajet de chargement radial  $\underline{\underline{\Sigma}}(t)$ , tel que :

$$\underline{\underline{\Sigma}}(t) = \sigma(t)\underline{\underline{S}}_0(\beta) \quad (\text{II.9})$$

L'intensité du chargement est pilotée par  $\sigma(t)$  et sa direction par  $\underline{\underline{S}}_0(\beta)$ . L'hypothèse de tube à paroi mince conduit à négliger  $\Sigma_{rr}$  par rapport aux deux autres composantes pour un état de contrainte en traction/pression interne (voir Eq. II.2). Le cisaillement maximal est relié au rayon du grand cercle de Mohr. Il en résulte que deux cas sont à considérer en fonction de la biaxialité  $\beta$  du chargement (voir Fig. II.9). Dans le repère cylindrique  $\mathcal{R} = (\underline{e}_r, \underline{e}_\theta, \underline{e}_z)$ , on pose :

$$\begin{aligned} \text{Si } \beta \leq 1 \quad \underline{\underline{S}}_0 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{\mathcal{R}} & \text{et } \sigma(t) &= \Sigma_{zz} \\ \text{Si } \beta > 1 \quad \underline{\underline{S}}_0 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1/\beta \end{pmatrix}_{\mathcal{R}} & \text{et } \sigma(t) &= \Sigma_{\theta\theta} \end{aligned} \quad (\text{II.10})$$

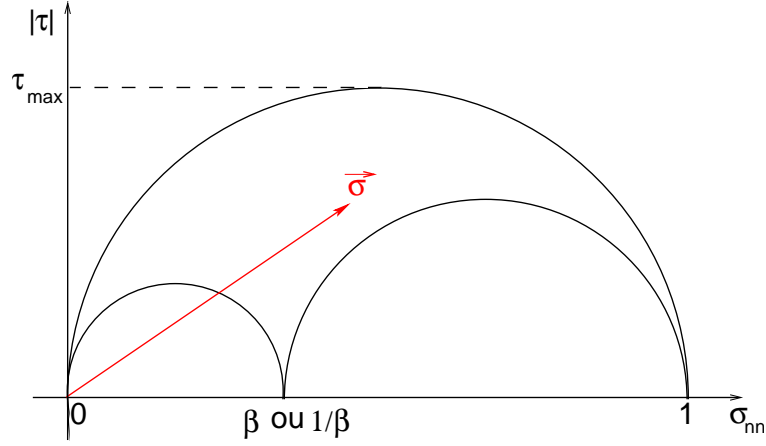


FIG. II.9 – Obtention de cisaillement maximum pour une sollicitation multiaxiale par le biais des cercles de Mohr.

Nous savons calculer la cission résolue sur un plan de glissement  $s$  grâce au tenseur d'orientation associé  $(\underline{\mu}^{(s)})$  et en déduire une expression de  $F^S(\beta)$ .

$$\tau^{(s)} = \underline{\Sigma}(t) : \underline{\mu}^{(s)} = \sigma(t) \left( \underline{S}_0(\beta) : \underline{\mu}^{(s)} \right) \implies F^S(\beta) = \max_{s \in S} \left| \underline{S}_0(\beta) : \underline{\mu}^{(s)} \right| \quad (\text{II.11})$$

On peut alors calculer la moyenne de  $F^S(\beta)$  sur l'ensemble des phases  $\varphi$  présentes dans le polycristal  $G$  à partir de la relation II.12 :

$$\langle F_\varphi^S(\beta) \rangle_G = \sum_{\varphi \in G} f_\varphi F_\varphi^S(\beta) \quad (\text{II.12})$$

où  $f_\varphi$  est la fraction volumique de la phase  $\varphi$ .

On trace sur les graphiques de la figure II.10, une représentation polaire de l'évolution de ces facteurs moyens avec le rapport de biaxialité  $\beta$  pour les différents systèmes de glissement des alliages hexagonaux. On observe que ces facteurs moyens dépendent très fortement de la distribution des orientations cristallines et que le passage isotrope/anisotrope modifie complètement la forme des courbes obtenues. En comparant les résultats pour les systèmes prismatiques et pyramidaux sur des textures isotrope et anisotrope (voir Fig.II.11), et en prenant en compte le rapport entre les cissions critiques prismatique et pyramidal, on s'aperçoit que le glissement prismatique est favorisé sur une large gamme de rapport de biaxialité  $\beta$  par rapport au glissement pyramidal. C'est seulement autour de la direction de chargement  $\beta = 1$  que les systèmes de glissement pyramidaux sont en moyenne mieux orientés que les systèmes prismatiques par rapport à la sollicitation pour le glissement.

## II Caractérisation expérimentale du comportement viscoplastique du Zy-4 recristallisé

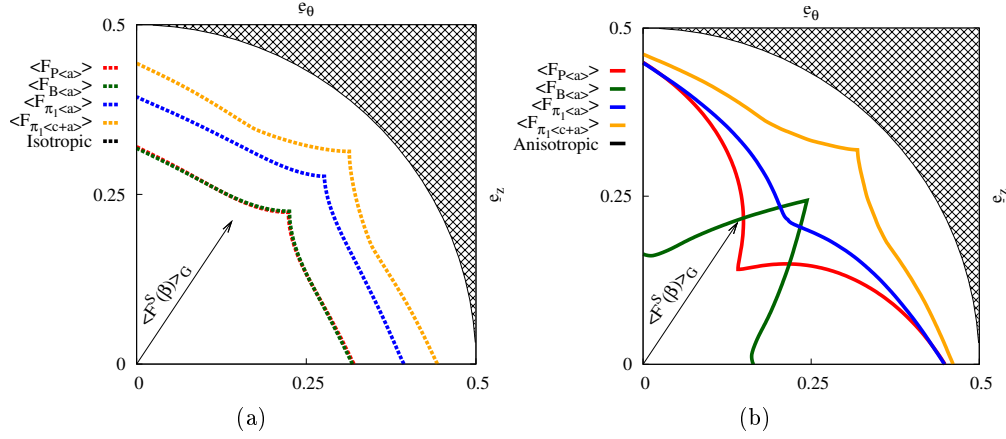


FIG. II.10 – Représentation polaire de l'évolution des facteurs de Schmid moyens pour (a) une texture cristallographique isotrope et (b) pour la texture d'un alliage Zy-4 recristallisé (voir Fig. I.5) pour les différents systèmes de glissement des alliages HCP.

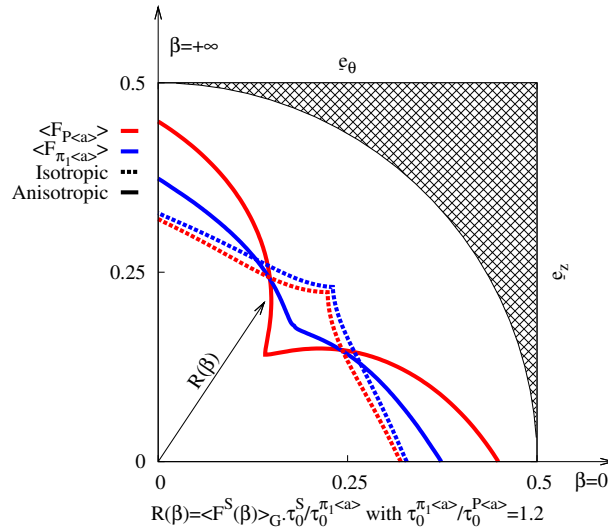


FIG. II.11 – Comparaison entre les représentations polaires pour des textures isotropes et anisotropes de l'évolution des facteurs de Schmid moyens prismatiques et pyramidaux en prenant en compte le ratio des cisssions critiques  $\tau_0^{P<a>} / \tau_0^{\pi_1<a>}$ .

### II.3.6 Anisotropie viscoplastique

L'anisotropie de comportement des alliages de zirconium provient de l'anisotropie de comportement du cristal et s'exprime à l'échelle macroscopique par le biais de la texture cristallographique. On propose ici de comparer les réponses en fluage obtenues pour trois rapports de biaxialité différents et d'analyser les résultats obtenus à la lumière des facteurs de Schmid.

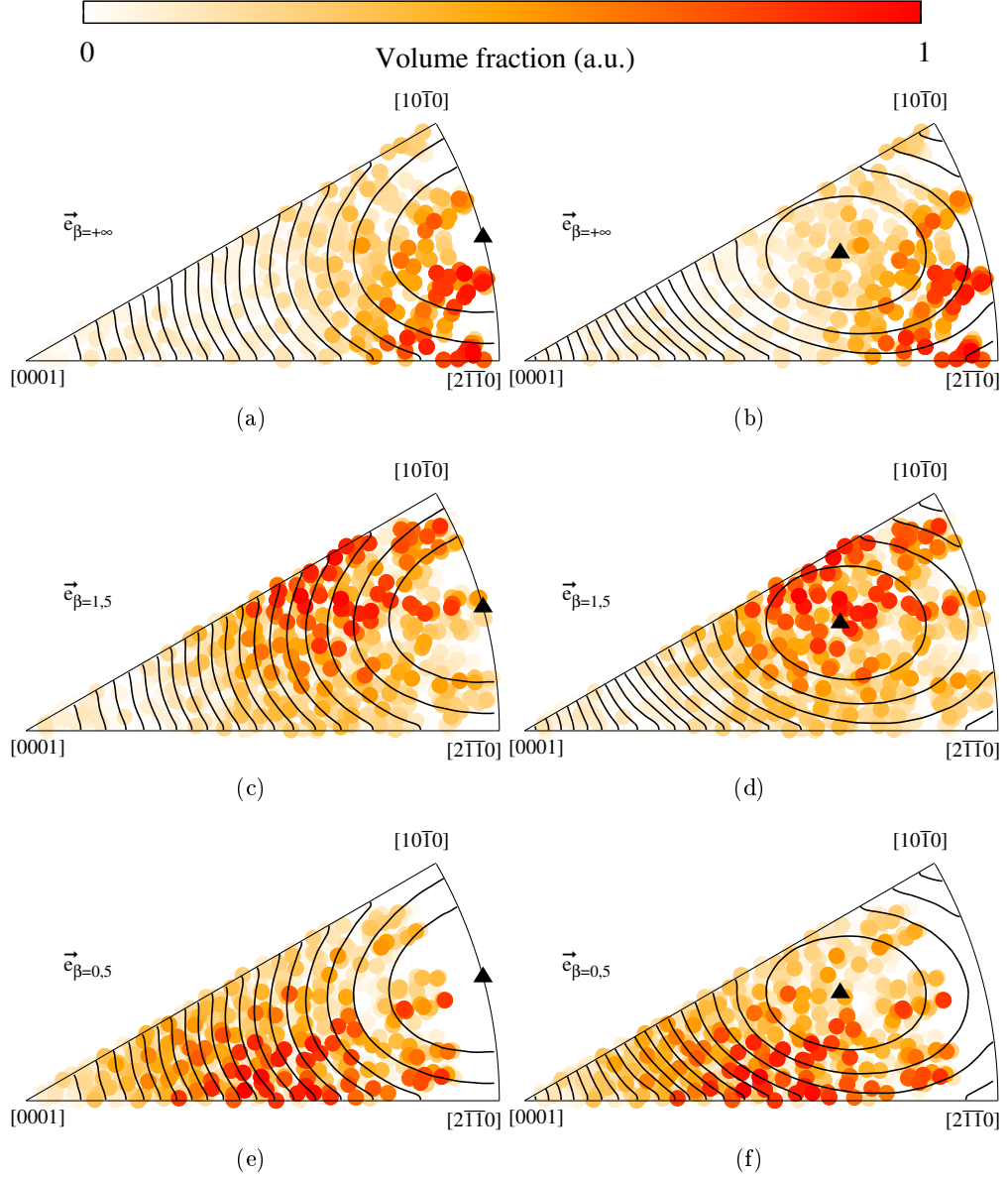


FIG. II.12 – Superposition des cartographies d'isovaleurs des facteurs de Schmid prismatiques (a,c,e) et pyramidaux (b,d,f) et des projections inverses dans les directions  $\beta = +\infty$  (a,b),  $\beta = 1,5$  (c,d) et  $\beta = 0,5$  (e,f) de la texture d'un alliage Zy-4 recristallisé.

L'évolution des déformations est donnée pour les trois essais sur la figure II.13. On observe que le polycristal est plus souple en fluage uniaxial qu'en fluage biaxial.

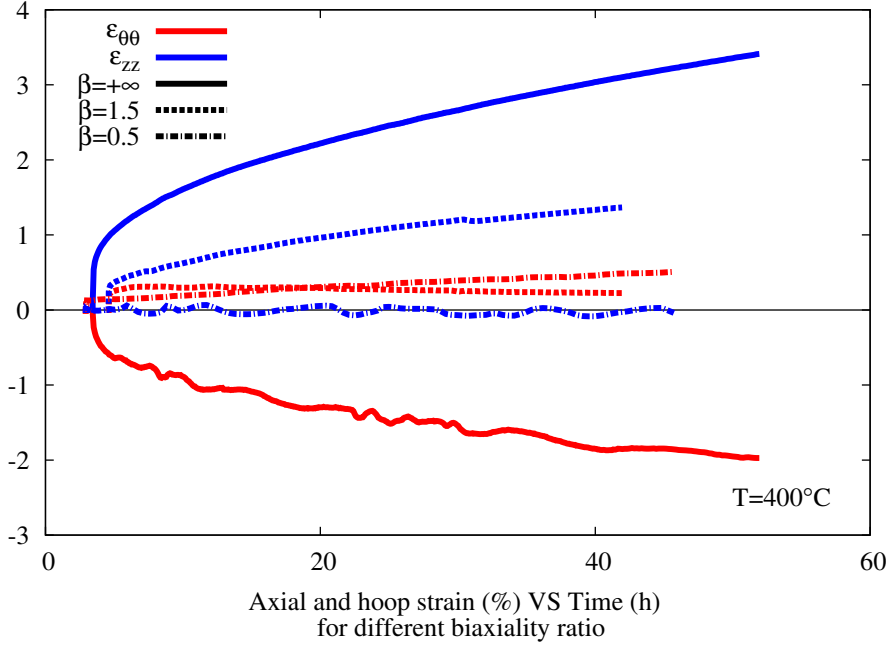


FIG. II.13 – Courbes de fluage obtenues à 400°C pour un alliage Zy-4 recristallisé [Grosjean 09] pour différents rapports de biaxialité du chargement mécanique. ( $\beta = +\infty$  :  $\Sigma_{zz} = 125\text{MPa}$  ;  $\beta = 1,5$  :  $\Sigma_{zz} = 165\text{MPa}$  et  $\beta = 0,5$  :  $\Sigma_{zz} = 65\text{MPa}$ ).

On peut superposer la cartographie des facteurs de Schmid prismatiques à la texture projetée dans le triangle standard selon les directions  $\underline{e}_\beta$  (pour  $\beta = +\infty$ , 1,5 et 0,5), on obtient alors les figures II.12(a), II.12(c) et II.12(e). On peut également faire la même chose mais en superposant la texture à la cartographie des facteurs de Schmid pyramidaux (voir Fig.II.12(b), II.12(d) et II.12(f)). Schématiquement, on obtient alors les deux figures II.14.

On observe que beaucoup plus de grains sont orientés favorablement pour le glissement prismatique lorsque le polycristal est sollicité dans la direction  $\beta = +\infty$  par rapport aux deux autres directions de chargement. Cette observation nous fournit donc la raison pour laquelle les alliages de zirconium recristallisés ont un comportement plus souple en fluage uniaxial suivant l'axe du tube qu'en fluage biaxial. Si on analyse maintenant la cartographie des facteurs de Schmid pyramidaux, on observe cette fois-ci que c'est la direction de chargement  $\beta = 1,5$  qui est la plus favorable au glissement pyramidal. En faisant l'hypothèse que le glissement dévié des dislocations des plans prismatique vers les plans pyramidaux est contrôlé par la cission sur les plans pyramidaux, on peut penser que le glissement dévié est plus actif dans la direction de chargement  $\beta = 1,5$  que dans les directions  $\beta = +\infty$  et  $\beta = 0,5$ .

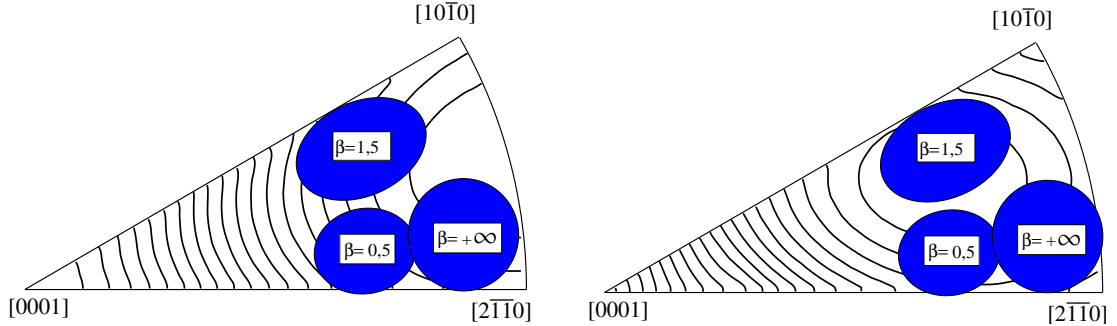


FIG. II.14 – Projection schématique de la texture d'un alliage Zy-4 recristallisé selon les directions  $\beta = +\infty, 1,5$  et  $0,5$  dans le triangle standard et cartographies des facteurs de Schmid prismatiques et pyramidaux.

## II.4 Comportement en relaxation

Les phénomènes de relaxation interviennent fréquemment dans les assemblages combustibles à l'échelle de la structure par le biais de compensation des jeux entre éléments mais également à l'échelle des matériaux constitutifs par le biais de mécanisme de dissipation viscoplastique. Dès lors qu'un état de déformation locale est imposé dans un matériau, pourvu que la température soit suffisamment élevée, on observe une chute plus ou moins rapide des contraintes.

On peut, par exemple, penser au phénomène d'interaction entre la pastille et la gaine qui intervient au bout d'un cycle en réacteur. Lors de la mise au contact, la gaine subit un écrouissage important sous l'effet de la poussée du combustible. Lorsque la pastille a atteint sa taille d'équilibre, elle impose à la gaine un état de déformation que la gaine va accommoder en relaxant son état de contrainte. La compréhension des mécanismes à l'origine des phénomènes de relaxation présente donc un intérêt industriel face à ce genre de problématique.

Pour finir, les essais de relaxation permettent de caractériser la viscosité d'un matériau et présentent l'avantage d'être beaucoup plus court que les essais de fluage. En effet, la durée d'un essai de relaxation est de l'ordre de 30 minutes dans cette étude alors qu'elle est de plusieurs jours pour les essais de fluage.

### II.4.1 Dispositif expérimental

Les essais de relaxation ont été réalisés sur la machine GLEEBLE 3500 au LIMATB sous vide secondaire entre  $280^{\circ}\text{C}$  et  $430^{\circ}\text{C}$ . La déformation diamétrale est mesurée par un extensomètre de type LVDT. On utilise l'effet Joule pour chauffer les éprouvettes qui sont instrumentées avec quatre thermocouples, deux dans la zone utile de mesure de la déformation et deux aux extrémités de l'éprouvette afin d'apprécier le gradient thermique global dans l'éprouvette. Les éprouvettes testées sont des tronçons de tubes



## II Caractérisation expérimentale du comportement viscoplastique du Zy-4 recristallisé

guides d'assemblages combustibles en Zy-4 recristallisé. Il s'agit du même alliage que celui testé en fluage.

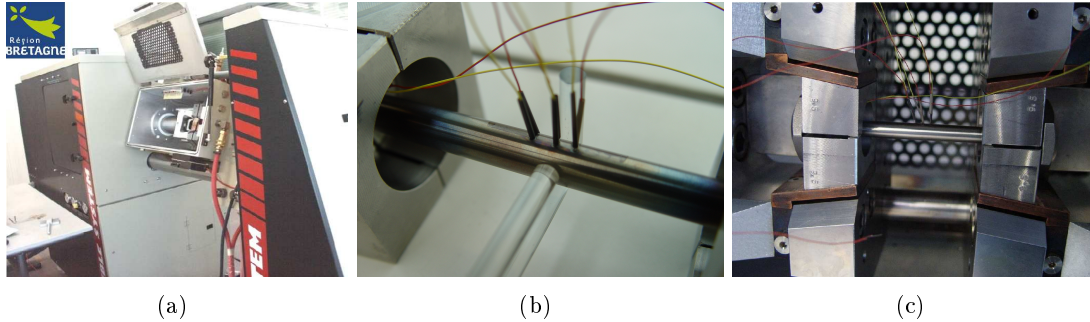


FIG. II.15 – (a) machine GLEEBLE DSI 3500 du LIMATB, (b) éprouvette instrumentée et (c) éprouvette mise en place.

### II.4.1.1 Gradient et stabilité thermique

Comme on peut le constater sur le graphique de la figure II.16, le gradient thermique dans la zone de mesure de la déformation est très faible ( $<2^{\circ}\text{C}/\text{cm}$ ). Il est par contre très important sur la totalité de l'éprouvette. De plus, on note une bonne stabilité de la température au cours de l'essai. Ces deux points nous permettent d'associer le comportement mécanique mesuré lors de cette campagne d'essais à une température.

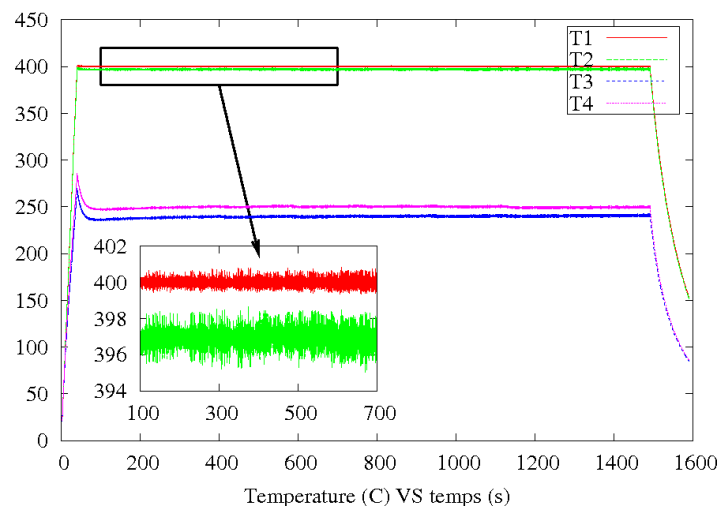


FIG. II.16 – Evolution de la température au cours d'un essai et gradient thermique dans la zone utile.

### II.4.1.2 Modélisation du problème thermoélectrique

Afin de se faire une idée du profil d'évolution de la température dans une éprouvette, une simulation du problème de couplage thermoélectrique a été entreprise sous le logiciel COMSOL Multiphysics<sup>®</sup>. Les conditions aux limites appliquées à la simulation du problème thermoélectrique sont schématisées sur la figure II.17. Les mors en acier inoxydable AISI 310 sont refroidis par une circulation d'eau et l'éprouvette émet un rayonnement  $\varphi_r$  qui vérifie la loi de Stefan-Boltzmann II.13.

$$\varphi_r = \varepsilon \sigma_s (T^4 - T_0^4) \quad (\text{II.13})$$

où  $\varepsilon$  est l'émissivité du zirconium et  $\sigma_s$  la constante de Stefan.

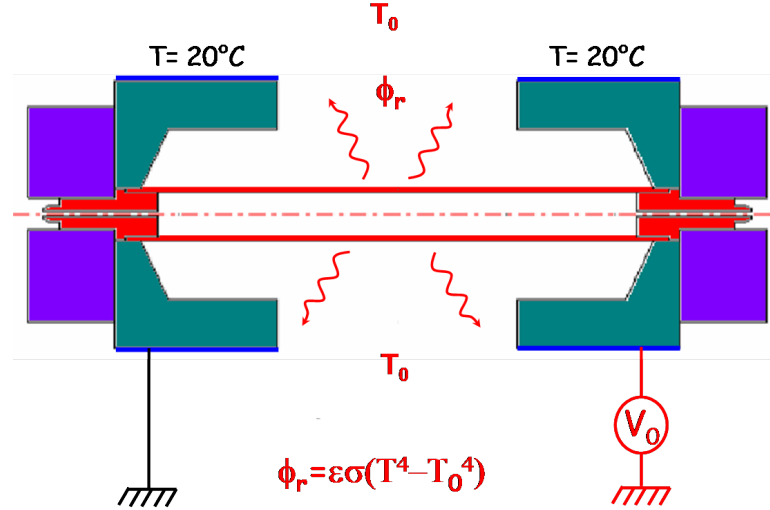


FIG. II.17 – Conditions aux limites de la modélisation du problème thermoélectrique.

Les propriétés thermiques et électrique utilisées pour le calcul sont répertoriées dans le tableau II.1. Pour les températures intermédiaires, la valeur des propriétés est interpolée linéairement.

Le comportement thermique est modélisé à partir de la loi de Fourier avec un terme source qui est fourni par la modélisation du problème électrique. L'évolution des grandeurs électriques est gouvernée par une loi de conduction qui dépend de la température à travers la conductivité électrique. Ces équations couplées qui sont résolues sur une géométrie axisymétrique en régime permanent sont formalisées par les expressions II.14.

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (\lambda(T) \nabla T) &= -\sigma(T) \nabla V^2 \\ -\nabla \cdot (\sigma(T) \nabla V) &= 0 \end{cases} \quad (\text{II.14})$$

## II Caractérisation expérimentale du comportement viscoplastique du Zy-4 recristallisé

| Température<br>(°C) | Conductivité électrique<br>(S.m <sup>-1</sup> ) |                     | Conductivité thermique<br>(W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> ) |           |
|---------------------|---|---------------------|---|-----------|
|                     | Acier   | Zirconium           | Acier   | Zirconium |
| 25                  |   | 0,5.10 <sup>7</sup> |   | 16,6      |
| 250                 |   | -                   |   | 21,2      |
| 400                 | 6.10 <sup>7</sup>                               | 1,0.10 <sup>7</sup> | 17  | -         |
| 750                 |   | 1,3.10 <sup>7</sup> |   | -         |
| 800                 |   | -                   |   | 22,2      |

TAB. II.1 – Evolution avec la température des conductivités électrique et thermique utilisées dans la simulation COMSOL.

Où  $\nabla$  est l'opérateur nabla,  $\sigma$  la conductivité électrique,  $\lambda$  la conductivité thermique,  $V$  le potentiel électrique et  $T$  la température.

Comme on peut le constater sur le graphique de la figure II.18(a), cette modélisation nous montre que la température suit une évolution parabolique le long de l'éprouvette et nous permet de trouver le potentiel  $V_0$  à appliquer pour atteindre une température cible au centre de l'éprouvette. Ce résultat est en accord avec les travaux de Norris publiés dans [Norris 99].

### II.4.1.3 Oxydation des éprouvettes

Les alliages de zirconium sont facilement oxydables. Une faible pression partielle d'oxygène dans l'enceinte sous vide secondaire suffit à oxyder les éprouvettes de façon superficielle. La couleur de l'oxyde déposé est directement liée à son épaisseur (voir Tab. II.2). Pour une durée d'essai constante (environ une demi heure de relaxation), on peut donc comparer les profils de coloration des éprouvettes pour les différentes températures d'essai sur la figure II.2. On observe par exemple que l'isochrome "bleu violacé", correspondant à une température de 350°C pour une durée de 30 minutes, se déplace de façon symétrique par rapport au centre de l'éprouvette dans les éprouvettes chauffées à plus haute température. Cette observation va donc dans le même sens que les simulations, à savoir une évolution parabolique de la température au sein de l'éprouvette lors d'un chauffage par effet Joule avec refroidissement latéral.

## II.4.2 Analyses des résultats

### II.4.2.1 Protocole expérimental

Le protocole expérimental employé lors des essais est le suivant : montée en température à vitesse contrôlée ( $\dot{T} = 10$  K/s) puis maintien isotherme. L'essai mécanique peut alors commencer : on pilote le déplacement du vérin et on impose des maintiens en position successifs permettant d'observer le phénomène de relaxation (voir Figure II.21(a)). Les mors sont refroidis par une circulation d'eau froide pour éviter leur endommagement et un échauffement local trop important de la matière au niveau des

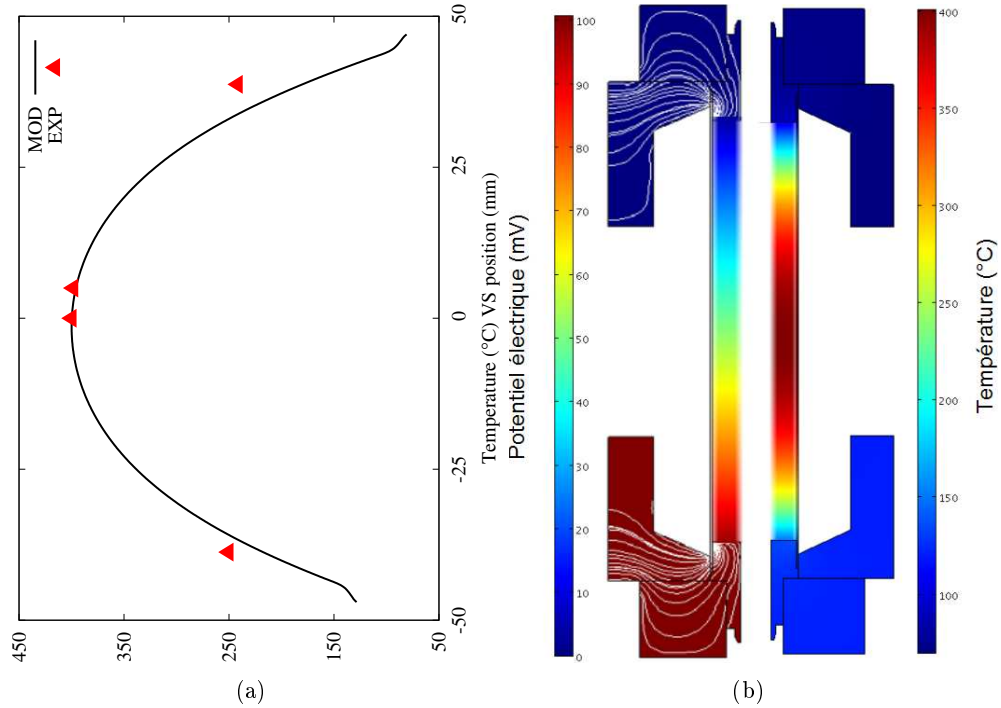


FIG. II.18 – Profil de température dans l'éprouvette : (a) confrontation modèle/expérience et (b) champ de potentiel, ligne de courant électrique et champ de température.

| Coloration       | Epaisseur de l'oxyde (nm) | Température (°C) |
|------------------|---------------------------|------------------|
| éclat métallique | < 8                       | < 280            |
| jaune paille     | 15                        | 320              |
| ambré            | 22                        | -                |
| mauve            | 35                        | -                |
| bleu violacé     | 39                        | 350              |
| bleu moyen       | 43                        | -                |
| bleu pâle        | 65                        | -                |



TAB. II.2 – Relation couleur de l'oxyde / épaisseur (source : AREVA NP/CEZUS) et évolution du profil de coloration des éprouvettes en fonction de la température d'essai.

points de contact. L'ensemble des essais de relaxation réalisés au cours de cette étude est synthétisé sur la figure II.19 sous la forme de courbes contrainte axiale / déformation circonférentielle. On peut observer que les phases de relaxation ne se déroulent pas à déformation rigoureusement constante. En effet, à cause de la viscosité du matériau, la déformation évolue au cours de l'essai même pour un déplacement figé du vérin.

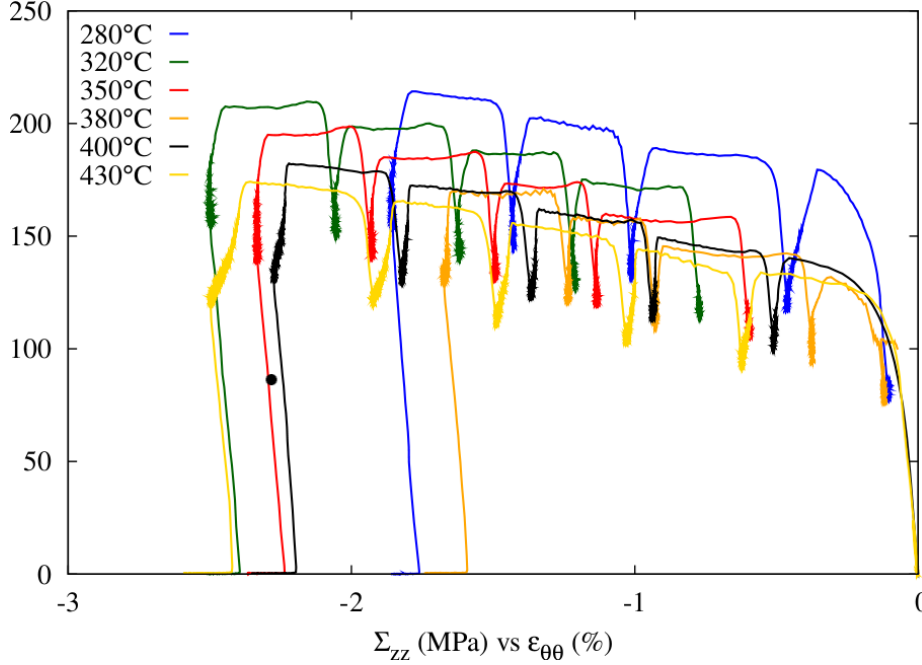


FIG. II.19 – Synthèse des résultats obtenus en relaxation uniaxiale : courbes contrainte axiale / déformation circonférentielle pour un alliage Zy-4 recristallisé pour différentes températures.

#### II.4.2.2 Comportement thermoélastique

##### Coefficient de dilatation circonférentiel

Les facteurs de Kearns introduits dans le premier chapitre de ce manuscrit permettent d'estimer le comportement thermoélastique effectif à partir des coefficients de dilatation du monocristal. Le déformation circonférentielle due à un échauffement  $\Delta T$  se calcule à partir de l'expression II.15.

$$\varepsilon_{\theta\theta}^{th} = \tilde{\alpha}_{\theta\theta} \Delta T = \int_0^{\Delta T} \alpha_{\theta\theta}(T) dT \quad \text{avec} \quad \alpha_{\theta\theta}(T) = \alpha_a (1 + f_\theta k_\alpha(T)) \quad (\text{II.15})$$

En supposant une évolution linéaire de  $k_\alpha$  avec la température, on pose :

$$k_\alpha(T) = k_1 T + k_0 \quad (\text{II.16})$$

Le coefficient de dilatation circonférentiel apparent  $\tilde{\alpha}_{\theta\theta}$  se calcule alors à partir de l'expression II.17.

$$\tilde{\alpha}_{\theta\theta} = \alpha_a \left( 1 + f_\theta k_0 + f_\theta \frac{k_1}{2} \Delta T \right) \quad (\text{II.17})$$

L'application numérique avec  $\alpha_a = 5,6 \cdot 10^{-6} \text{K}^{-1}$ ,  $k_1 = 2,5 \cdot 10^{-3}$ ,  $k_0 = 9,0 \cdot 10^{-2}$  (les coefficients de dilatation du monocristal sont issus de [Russel 54]) et  $f_\theta = 0,36$  et  $\Delta T =$

## II.4 Comportement en relaxation

200°C donne  $\tilde{\alpha}_{\theta\theta} = 6,3 \cdot 10^{-6} \text{K}^{-1}$  à comparer à la valeur trouvée expérimentalement  $\tilde{\alpha}_{\theta\theta} = (6,1 \pm 0,2) \cdot 10^{-6} \text{K}^{-1}$ .

### Modules d'élasticité

Les essais réalisés présentent une certaine particularité puisque l'on sollicite l'éprouvette axialement et que l'on mesure la déformation circonférentielle. Par conséquent, au cours du régime élastique, nous pouvons caractériser uniquement le rapport  $E/\nu$ . Cette caractérisation a été réalisée à la charge et à la décharge pour les différentes températures d'essai. Le graphique de la figure II.20(a) donne ainsi l'évolution du rapport  $E/\nu$  avec la température à la charge et à la décharge. On observe sur cette figure une décroissance globale de ce rapport avec la température. Le module de Young exprime la force de rappel électrostatique qui tend à maintenir les atomes à distance constante. Il peut s'exprimer en fonction de la dérivée seconde du potentiel interatomique. Comme l'agitation thermique tend à augmenter la distance moyenne interatomique, elle conduit à un étalement du puits de potentiel, la contribution entropique à la distance interatomique moyenne mène à une décroissance des modules avec la température. Enfin, nous observons que le module est globalement plus faible à la décharge qu'à la charge. Cette observation est à relier à l'augmentation de la densité de dislocations dans un matériau plastifié, l'élasticité "portée" par les dislocations conduit à une diminution du module avec la déformation plastique.

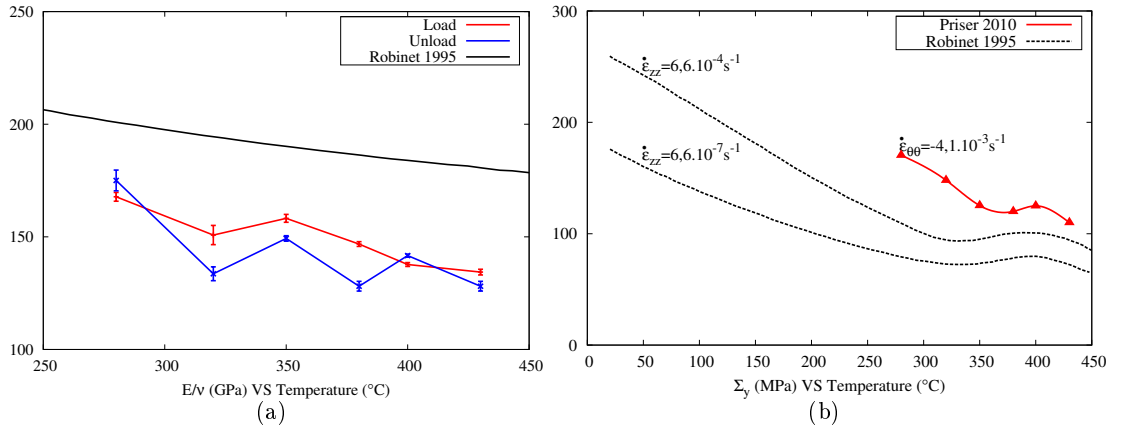


FIG. II.20 – Evolution avec la température (a) des modules d'élasticité (rapport  $E/\nu$ ) à la charge et à la décharge et (b) de la limite d'écoulement pour un niveau de déformation plastique circonférentielle de  $-0,1\%$ . Comparaison des résultats avec les données issues de [Robinet 95].

### II.4.2.3 Limite d'élasticité

On peut également mesurer sur ces essais l'évolution de la limite d'écoulement avec la température. Si l'on représente cette évolution sur le graphique II.20(b), il apparaît assez nettement un plateau où la contrainte d'écoulement n'évolue plus avec la

température. Cet effet est classiquement attribué à l'oxygène en solution solide et à son interaction avec les dislocations sous la forme de nuages de Cottrell. Dans un régime où la vitesse moyenne des dislocations est du même ordre de grandeur que la vitesse de diffusion des solutés (qui correspond à un domaine de température donné), les atomes d'oxygène ségrègent autour des dislocations exerçant une force de friction supplémentaire sur les dislocations. Dans le domaine de température où ces interactions s'expriment, cela contribue à augmenter la limite d'élasticité d'où une stabilisation de la limite d'écoulement dans ce domaine de température.

#### II.4.2.4 Estimation des volumes d'activation

Les essais de relaxation peuvent être analysés en terme de volumes d'activation apparents. Ces quantités peuvent être vues comme des signatures macroscopiques des mécanismes microscopiques viscoplastiques. Elles correspondent à la sensibilité macroscopique de l'écoulement viscoplastique à la contrainte et s'établit à partir de la relation II.18. Remarquons que cette formulation n'est pas classique en ce sens où on dérive la vitesse de déformation circonférentielle par rapport à la contrainte axiale mais permet néanmoins d'accéder à des informations sur la viscosité des mécanismes de déformation.

$$V_{app} = k_B T \frac{\partial \ln |\dot{E}_{\theta\theta}^{vp}|}{\partial \Sigma_{zz}} \quad (\text{II.18})$$

Le volume d'activation d'un mécanisme de glissement est relié à la surface balayée par une dislocation pour atteindre une configuration critique lui permettant de se propager sur le système de glissement considéré et ainsi d'activer la plasticité à l'échelle microscopique. Pour les gammes de température  $T < 430^\circ\text{C}$  et de contrainte ( $\Sigma_{zz} < 200\text{MPa}$ ) visitées, la viscoplasticité de l'alliage Zy-4 recristallisé est pilotée par le glissement prismatique des dislocations. Si l'on prend un facteur de Taylor  $M_T = 4$  [Luton 72], on peut estimer un volume d'activation du glissement prismatique en considérant que c'est le seul mécanisme actif. En utilisant le schéma de transition d'échelle simplifié de Taylor, on peut relier le volume apparent aux grandeurs microscopiques grâce à la relation II.19.

$$\frac{1}{k_B T} V_{app} = \frac{1}{M_T} \frac{\partial \ln |\dot{\gamma}^s|}{\partial \tau} \Big|_{T, \mu_s} + \frac{\partial \ln \rho_m}{\partial \tau} \Big|_{T, \mu_s} \quad (\text{II.19})$$

où  $\dot{\gamma}^s$  est le taux de cisaillement du système  $s$  et  $\rho_m$  la densité de dislocations mobiles.

Au travers de l'expression II.19, on voit que l'on peut relier le volume apparent au volume d'activation microscopique à partir du moment où la densité de dislocations a saturé et n'évolue plus au sein de la microstructure. Or, nécessairement au cours de l'écoulement viscoplastique du matériau, la densité de dislocations augmente, ce qui conduit à une diminution du volume apparent avec la déformation plastique. Si l'on trace pour chaque phase de relaxation, l'évolution de la vitesse de déformation viscoplastique avec la contrainte, on s'aperçoit que l'on obtient une série de droites presque parallèles dont la pente est proportionnelle au volume apparent. Cette évolution

## II.4 Comportement en relaxation

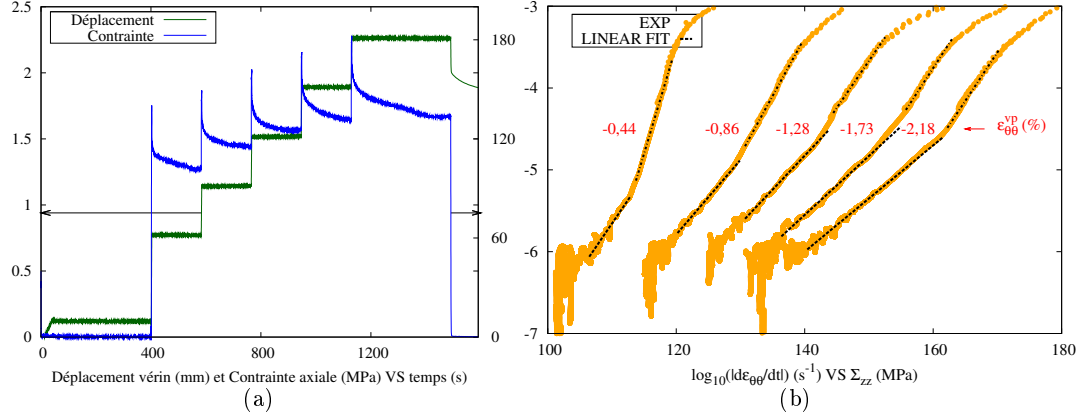


FIG. II.21 – (a) Sollicitation (déplacement) et réponse (contrainte) mécanique de l'alliage testé à 400°C et (b) estimation des volumes d'activation apparents pour les différentes phases de relaxation (correspondant à différents niveaux de déformation plastique).

particulière est donc reliée à la saturation de la densité de dislocations dans le matériau. L'évolution des volumes d'activation apparents avec la déformation plastique pour un essai à 400°C fait suite à cette estimation et est donnée dans le tableau II.3. On note sur le graphique II.21(b) que deux pentes apparaissent qui conduisent à la détermination de deux volumes d'activation distincts. Geyer [Geyer 99a] attribue le stade haute contrainte aux interactions à courte distance thermiquement activées alors que le régime basse contrainte est selon lui associé à la restauration partielle de l'état de contrainte interne.

| Déformation plastique<br>$\epsilon_{\theta\theta}^{vp}$ (%) | Volume apparent<br>( $b^3$ ) |                  |
|---|------------------------------|------------------|
|   | Basse contrainte             | Haute contrainte |
| -0,44   | 73                           | 167              |
| -0,86   | 58                           | 91               |
| -1,28   | 53                           | 68               |
| -1,73   | 46                           | 71               |
| -2,18   | 41                           | 72               |

TAB. II.3 – Evolution des volumes d'activation apparents à 400°C avec la déformation plastique.

Ce travail d'estimation des volumes d'activation apparent a été effectué pour chaque température d'essai. On représente ainsi sur la figure II.22 l'évolution du volume apparent avec la température pour un niveau de déformation viscoplastique circonférentielle suffisamment grand (supérieur à 2%) afin de s'affranchir des effets transitoires dus à l'évolution de la densité de dislocations. On observe une évolution avec un maximum vers 350°C, c'est-à-dire dans la plage de température où le matériau montre une sensibilité au vieillissement dynamique. Il semble de plus qu'au delà de 400°C, on sort du



domaine où les effets du vieillissement se manifestent. Les résultats obtenus lors de cette étude sont confrontés aux résultats obtenus par Yi *et al* [Yi 92]. Afin de déterminer les paramètres d'activation de l'écoulement viscoplastique d'un alliage Zy-4, ils utilisent un mandrin en cuivre qu'ils disposent à l'intérieur d'un tube en Zy-4. L'échauffement du dispositif provoque une dilatation plus importante du mandrin que du tube et permet d'imposer un niveau de déformation orthoradiale constant dans le tube. Cette sollicitation est donc différente d'une sollicitation en traction uniaxiale et on peut penser que les différences que l'on observe sur les volumes apparents avec nos résultats sont dues à l'anisotropie de l'alliage.

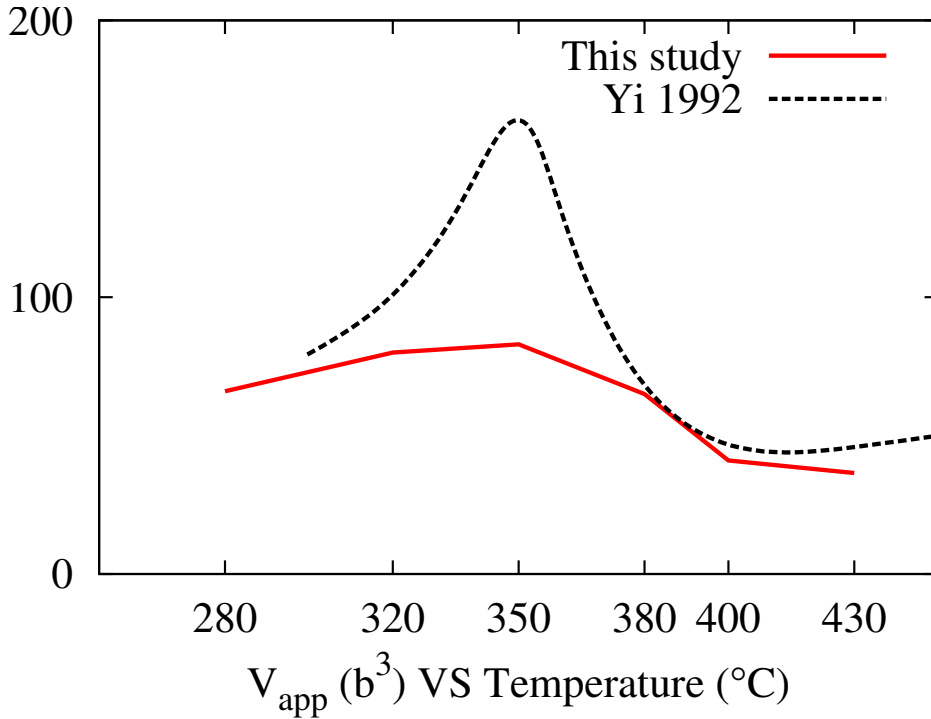


FIG. II.22 – Evolution avec la température des volumes d'activation apparents pour la dernière relaxation pour  $\varepsilon_{\theta\theta}^{vp} > 2\%$  et comparaison avec les résultats obtenus par Yi *et al* [Yi 92].

## II.4 Comportement en relaxation

---

Dans ce chapitre, les données issues des essais de fluage multiaxés nous ont permis de caractériser l'anisotropie de comportement à 400°C de l'alliage Zy-4 recristallisé. Les résultats ont été analysés en terme de vitesse de fluage stationnaire équivalente et représentés sous la forme de coupes de surfaces isovitesse dans le plan  $(\Sigma_{\theta\theta}, \Sigma_{zz})$ . L'anisotropie viscoplastique de l'alliage Zy-4 est mise en évidence en superposant les résultats expérimentaux à la surface obtenue à l'aide d'un critère isotrope de von Mises. Il ressort de cette comparaison que la réponse du Zy-4 recristallisé à 400 °C en fluage fortement circonférentiel est bien plus raide que pour un chargement uniaxial suivant  $z$  par rapport à une configuration isotrope.

Les analyses MET de ces essais indiquent que le glissement prismatique reste le mécanisme de déformation majoritairement observé dans les alliages de zirconium recristallisés sollicités en fluage à 400°C pour des vitesses de déformation comprises entre  $10^{-9}\text{s}^{-1}$  et  $10^{-6}\text{s}^{-1}$ . Le glissement dévié des dislocations vis des plans prismatiques vers les plans pyramidaux de première espèce est également fréquemment observé comme mécanisme de franchissement des obstacles à courte distance. On note de plus une activité non négligeable des systèmes de glissement  $\pi_1\langle a \rangle$ . Enfin, aucune dislocation  $\langle c+a \rangle$  n'a pu être observée.

Pour terminer, la cartographie dans le triangle standard des isovaleurs des facteurs de Schmid prismatiques et pyramidaux a été confrontée à la texture cristallographique caractéristique d'un alliage de zirconium recristallisé projetée dans différentes directions  $(\beta = +\infty; 1; 0)$ . Il en ressort que beaucoup plus de grains sont favorablement orientés pour le glissement prismatique pour une sollicitation uniaxiale suivant  $z$  que pour des sollicitations pour lesquelles  $\beta = 1$  et  $\beta = 0$ . La distribution des facteurs de Schmid dans un polycristal nous permet donc de mieux comprendre l'anisotropie EVP des alliages de zirconium.

Dans un second temps, une campagne d'essais en traction axiale avec relaxation, sur le même alliage que celui testé en fluage, a été entreprise dans le cadre de cette étude. Le champ de température dans les éprouvettes est étudié par le biais d'une simulation thermoélectrique couplée. En accord avec les mesures expérimentales, ces simulations mettent en évidence un profil parabolique du champ de température ainsi qu'un faible gradient thermique dans la zone de mesure de la déformation. Les mesures indiquent de plus une bonne stabilité de la température au cours du temps.

Ces essais de relaxation ont été réalisés pour des températures comprises entre 280°C et 430°C. On déduit de ces essais l'évolution avec la température de la limite d'écoulement et du volume d'activation apparent. Les résultats obtenus montrent un bon accord avec les données issues de la littérature. Les effets du vieillissement dynamique sont manifestes dans la gamme de température visitée : on observe un pallier "athermique" dans lequel la contrainte d'écoulement n'évolue plus avec la température et un pic de volume d'activation dans la même gamme de température. Il semble que l'on soit sorti du domaine de vieillissement lorsque  $T \geq 430^\circ\text{C}$ .



# Chapitre III

---

## Transition d'échelle dans les polycristaux hexagonaux

---

### III.1 Introduction

Les prémices d'une règle de changement d'échelle fondée sur l'introduction de variables d'accommodation  $\underline{\beta}_{\varphi}$  ont initialement été proposés par Cailletaud [Cailletaud 87]. Cette idée n'avait cependant pas fait l'objet d'une étude approfondie puisque le modèle n'avait pas été utilisé et était resté à l'état de concept. Le développement de cette règle de changement d'échelle s'est poursuivi quelques années plus tard par les travaux de Pilvin [Pilvin 90] dans lesquels il propose une formulation du modèle en  $\beta$  qui assure notamment l'autoéquilibrage du problème au travers des relations III.1.

$$\underline{\sigma}_{\varphi} = \underline{\Sigma} + 2\mu(1 - \beta_E)(\underline{B} - \underline{\beta}_{\varphi}) \text{ avec } \underline{B} = \sum_{\varphi \in G} f_{\varphi} \underline{\beta}_{\varphi} \quad (\text{III.1})$$

où  $f_{\varphi}$  est la fraction volumique de la phase  $\varphi$  et  $G$  l'ensemble des phases du polycristal.

Dans le but de valider cette stratégie de changement d'échelle, les prédictions du modèle en  $\beta$  de Cailletaud-Pilvin ont été confrontées aux résultats de calculs par EF d'inclusions plongées dans un milieu homogène isotrope [Cailletaud 94]. Cette étude démontre la pertinence de cette méthodologie quant à sa capacité à décrire de façon satisfaisante les champs moyens dans les phases d'un polycristal. L'inconvénient de cette approche est qu'elle nécessite la connaissance du comportement effectif alors que celui-ci n'est *a priori* pas connu. Cette méthode de validation est donc améliorable puisqu'elle nécessite de faire des hypothèses importantes sur le comportement homogénéisé du polycristal. L'objet de ce chapitre est justement de proposer une méthode, fondée sur

des calculs d'agrégats par éléments finis, afin de mieux représenter la forme des grains et la notion de phase cristallographique. Les premières applications du modèle en  $\beta$  concernent les alliages CFC à texture isotrope principalement pour des comportements en fatigue oligo-cyclique qui ont fait l'objet de plusieurs publications, notamment dans [Pilvin 97, Gaudin 02, Feaugas 09].

L'application de la règle de changement d'échelle en  $\beta$  pour des alliages de zirconium fait suite aux travaux de Vogel [Vogel 96], de Geyer [Geyer 99a] et d'Onimus [Onimus 03]. Afin d'estimer les paramètres ajustables de la règle en  $\beta$  associés à la cinétique d'accommodation intergranulaire, Pilvin propose d'identifier le comportement simulé par le modèle  $\beta$  sur le comportement obtenu par le modèle de Berveiller et Zaoui (BZ) pour un essai d'écroutissage monotone sur un polycristal à texture isotrope afin de satisfaire les hypothèses du modèle BZ. L'ajustement des paramètres de la règle en  $\beta$  est alors réalisé en minimisant l'écart entre les deux modèles pour les contraintes et les déformations dans dix orientations différentes. Cette technique permet, avec des coûts de calcul réduits, d'approcher les conditions d'auto-cohérence du modèle en  $\beta$ , puis de l'utiliser dans un cadre élargi par rapport au modèle BZ. Toutefois, on est en droit de s'interroger sur la validité de cette démarche pour des polycristaux texturés et il paraît préférable d'ajuster les paramètres de la règle de changement d'échelle sur des calculs d'agrégats. Les calculs d'agrégats vont nous permettre en outre d'apporter des éléments de réponse quant à la pertinence de la technique d'estimation proposée par Pilvin décrite plus haut pour des polycristaux non cubiques.

Dans la mesure où les alliages de zirconium possèdent peu de systèmes de glissement pour accommoder la déformation plastique suivant la direction  $c$ , ils présentent une forte anisotropie de comportement local. Cette anisotropie s'exprime à l'échelle macroscopique par le biais de la texture cristallographique spécifique aux produits laminés. Contrairement aux alliages HCP, les alliages BCC et FCC possèdent de nombreux systèmes de glissement permettant d'accommoder la déformation dans toutes les directions du cristal. Il en résulte un comportement EVP moins contrasté à l'échelle des grains. La question que l'on se pose est alors la suivante : quel est l'impact de l'anisotropie locale sur la règle de changement d'échelle ? La règle en  $\beta$  reste-t-elle toujours valide pour des alliages hexagonaux ?

Dans le but de répondre à ces interrogations, nous mettons en œuvre dans ce chapitre des calculs EF d'agrégats. De nombreux auteurs ont développé cette technique par le passé dans divers contextes [Barbe 01a, Barbe 01b, Diard 05]. Il semble que cette technique de calcul intensif soit devenue mature pour permettre de faire de "l'expérimentation numérique" et d'en déduire une estimation fiable des champs locaux. Ces calculs vont nous permettre d'élaborer une solution de référence en élastoviscoplasticité, qui sera confrontée aux résultats fournis par les modèles classiques de changement d'échelle présentés à la fin du premier chapitre. Les maillages ont été générés avec le code CAST3M, les calculs sont conduits avec le code Abaqus® et le comportement non linéaire est introduit sous la forme d'une sous-routine utilisateur (UMAT). L'avantage des

calculs en champs complets que l'on va utiliser dans notre démarche est la transition d'échelle implicite qui s'y opère. En effet, lorsqu'un agrégat polycristallin est soumis à une sollicitation macroscopique, le déroulement du calcul assure que chaque élément est en équilibre mécanique si bien que les incompatibilités de déformation entre grains sont gérées automatiquement.

Dans le schéma auto-cohérent classique, toutes les phases cristallines sont en interaction directe avec le Milieu Homogène Equivalent (MHE). De nombreuses méthodes de changement d'échelle ont été proposées pour résoudre ce problème, mais aucune ne fournit de solution rigoureuse en élastoviscoplasticité [Forest 01]. Sans cette solution, le développement de méthodes approchées telle que la règle en  $\beta$  semble pertinent seulement si les conditions d'auto-cohérence du modèle proposé sont analysées.

Dans ce chapitre, nous nous intéressons tout d'abord à décrire les calculs EF d'agrégats qui ont été développés au cours de cette étude. Nous décrivons dans cette partie la géométrie des agrégats, la gestion des orientations cristallographiques des grains, la loi de comportement utilisée, ainsi que les modes de chargement retenus pour solliciter les agrégats. Dans une seconde partie, nous proposons un processus d'estimation statistique du comportement d'une phase cristallographique en élastoviscoplasticité. Nous concluons ce chapitre en confrontant les résultats issus de ce processus d'estimation aux règles de changement d'échelle classiquement utilisées dans le domaine de l'homogénéisation des polycristaux. Finalement, nous proposons des extensions de la règle en  $\beta$  dans le but de mieux décrire l'écoulement EVP des phases de structure cristallographique HCP.

## III.2 Description des calculs EF d'agrégats

### III.2.1 Maillages & géométrie

#### III.2.1.1 Processus de Voronoï

Les maillages utilisés dans cette étude ont été générés sous CAST3M [[www-cast3m.cea.fr](http://www-cast3m.cea.fr)] par une procédure développée par Serge Pascal au CEA [Paola 10]. Les maillages d'agrégats sont construits sur une mosaïque de Voronoï. Considérant  $N$  germes distribués aléatoirement dans un cube unitaire, nous pouvons construire la mosaïque de Voronoï associée en considérant la définition suivante :

$$V_i = \{ \underline{X} \in \mathbb{R}^3 \mid \forall j \neq i \in \llbracket 1, N \rrbracket, d(\underline{X}, \underline{X}_i) \leq d(\underline{X}, \underline{X}_j) \} \quad (\text{III.2})$$

où  $d$  est la distance euclidienne dans  $\mathbb{R}^3$ .

En d'autres termes, la cellule de Voronoï,  $V_i$ , associée à un germe donné est constituée de l'ensemble des points les plus proches du germe  $i$  que de n'importe quels autres germes. Des exemples de cellules de Voronoï sont illustrés sur les figures III.1(a), III.1(b)

et III.1(c).

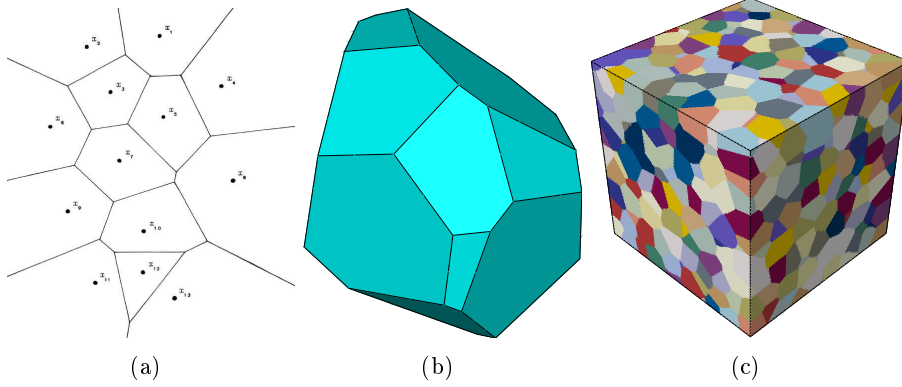


FIG. III.1 – (a) Cellules de Voronoï en 2D et (b) 3D (grain polyédriques d'un agrégat) et (c) mosaïque de Voronoï d'un agrégat constitué de 1000 grains.

Le processus de génération de microstructures basé sur un algorithme de Voronoï est finalement très proche d'un processus de solidification à germes aléatoires. Si les germes sont distribués suivant un processus poissonnien en respectant une distance de répulsion isotrope entre les germes. Cet algorithme conduit nécessairement à une microstructure équiaxe [Barbe 01a] comme nous pouvons le visualiser sur la figure III.1(c).

### III.2.1.2 Caractérisation morphologique des géométries granulaires

Dans l'idée de quantifier le caractère équiaxe des microstructures générées, on introduit la notion de facteur de forme des grains et on souhaite estimer la distribution statistique de ces facteurs au sein des agrégats. Le facteur de forme d'un grain  $g$  suivant une direction donnée  $X$ ,  $F_X^g$ , est défini comme le rapport entre le cube de la projection de la distance maximum entre deux points du grain dans la direction  $X$  et le volume  $V_g$  du grain  $g$ . Une explication schématique de ce facteur apparaît figure III.2(a).

$$F_X^g = \frac{\pi (\Delta X)^3}{6 V_g} \quad (\text{III.3})$$

La constante  $\pi/6$  est introduite pour obtenir  $F_X^g = 1$  dans le cas d'une sphère. Comme on peut le constater sur la figure III.2(b), les facteurs de forme sont distribués autour d'une valeur unitaire dans les trois directions du cube, indiquant que les microstructures générées par la procédure de Voronoï sont effectivement équiaxes. Une analyse plus détaillée de ces facteurs de forme indique qu'une grande majorité des grains très éloignés de la sphéricité sont en fait coupés par l'une des faces du cube. Pour résoudre ce problème, on pourrait utiliser des maillages périodiques dits en framboise [Gérard 08], mais ils sont d'un usage plus technique, notamment par rapport à l'application des conditions aux limites.

### III.2 Description des calculs EF d'agrégats

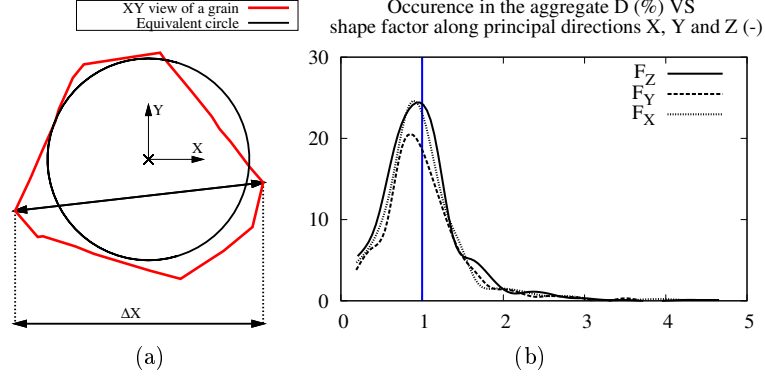


FIG. III.2 – (a) Définition et (b) distribution des facteurs de forme dans un agrégat contenant 512 grains.

Les calculs d'agrégats ont été réalisés pour un nombre de grains compris entre 343 ( $7^3$ ) et 1000 ( $10^3$ ) grains. Les maillages ainsi élaborés sont constitués de plusieurs centaines de milliers d'éléments tétraédriques (cf tableau III.1)). Les calculs entrepris sont donc coûteux en temps mais les durées restent acceptables (environ 15 heures pour un calcul d'agrégat contenant 343 grains en monocœur sur un processeur quatre cœurs dont le modèle est Intel®Xeon®X5460@3.16GHz).

Une autre donnée importante pour caractériser ces agrégats est la distribution de taille de grains. En métallurgie, on sait que la taille de grains affecte directement les propriétés d'un polycristal *via* la relation de Hall-Petch. Un polycristal aura une limite d'élasticité apparente qui sera plus élevée lorsque la taille moyenne des grains sera plus faible. Bien sûr, si le mécanisme de déformation fait intervenir les joints de grain, comme par exemple le fluage Coble, le polycristal sera plus souple à cause de la densité de joints de grains élevée. Il est important de noter qu'il n'y a pas d'effet d'échelle dans nos calculs et que l'effet de taille est relatif et non absolu comme c'est le cas dans la relation de Hall-Petch. La théorie des milieux continus généralisés [Forest 06] permet d'introduire ces effets de taille mais ce n'est pas l'objet de cette étude.

| Maillage | Grains        | Elements (C3D4) | Nœuds  |
|----------|---------------|-----------------|--------|
| A        | 343 = $7^3$   | 335880          | 61515  |
| B        | 512 = $8^3$   | 493552          | 89588  |
| C        | 729 = $9^3$   | 944062          | 169121 |
| D        | 1000 = $10^3$ | 1291266         | 230152 |

TAB. III.1 – Caractéristiques des maillages en fonction du nombre de grains dans l'agrégat.

Notons que les polyèdres générés à partir du processus de Voronoï sont discrétisés en éléments tétraédriques (C3D4 dans Abaqus®). On se contente dans cette étude d'une



interpolation linéaire par élément du champ de déplacement dans la mesure où l'on cherche à évaluer les champs moyens pour un grain situé au centre du cube.

En utilisant l'hypothèse équiaxe des microstructures, on peut définir un rayon équivalent  $R_{eq}^g$  à partir du volume du grain considéré suivant la relation :

$$R_{eq}^g = \sqrt[3]{\frac{3V_g}{4\pi}} \quad (\text{III.4})$$

On peut alors tracer la distribution de taille de grains au sein du polycristal. Comme on peut le constater sur la figure III.3(a), les mesures EBSD réalisées sur un alliage Zy-4 recristallisé sont plus dispersées autour de la valeur moyenne que les distributions numériques. D'autres études [Liu 10] menées sur des matériaux nanocristallins ont montré que la distribution de taille de grains pouvait fortement affecter les propriétés mécaniques du matériau. Pour ce qui nous concerne, nous considérerons qu'il s'agit là d'un effet du second ordre étant donnée la taille moyenne de grains de nos alliages ( $\sim 10\mu m$ ).

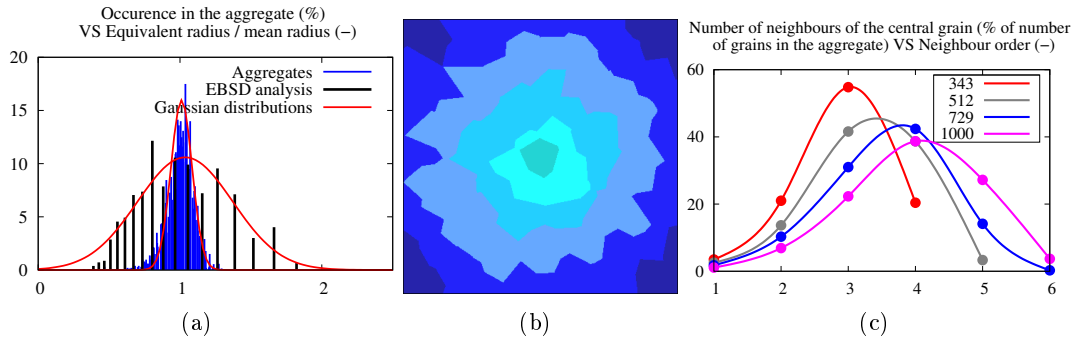


FIG. III.3 – Quelques distributions statistiques dans les agrégats : (a) distribution de taille de grains et (b) visualisation et (c) distribution du voisinage du grain central.

Pour terminer sur cette partie de caractérisation morphologique des agrégats, nous avons également regardé la distribution du voisinage du grain central. En considérant le rayon moyen  $R_{moy}$  des grains, nous pouvons définir un voisinage d'ordre  $N$  comme étant l'ensemble des grains dont les centroïdes sont situés entre deux sphères de rayon respectifs  $N.R_{moy}$  et  $(N + 1).R_{moy}$ . On peut alors tracer la distribution de l'ordre du voisinage pour différentes tailles d'échantillons (cf Fig. III.3(c)). Logiquement, on observe que plus l'échantillon a un nombre de grains important, plus cette distribution s'étale vers les grands ordres. Notons que dans ce cas, la notion de premiers voisins (voisins en contact avec le grain central) correspond aux voisins d'ordre 1 introduit dans cette partie, si la distribution de taille de grains est suffisamment homogène.

### III.2.1.3 Analyse de la discrétisation EF

Une fois la géométrie de l'agrégat obtenue grâce au processus de Voronoï, le polycristal est maillé en utilisant une triangulation de Delaunay. Afin d'obtenir une bonne

description du gradient des champs mécaniques, les grains sont finement maillés avec environ 1000 éléments tétraédriques à interpolation linéaire (C3D4 sous Abaqus). Afin d'estimer le niveau des erreurs de discrétisation du calcul EF, nous avons mené une étude paramétrique de l'influence de la densité de maillage pour un agrégat constitué de huit grains ayant un comportement élastique anisotrope (élasticité cubique). Les résultats apparaissent sur la figure III.4. Sur ce graphique, nous représentons, pour un agrégat contenant huit grains, l'influence de la densité de maillage sur la valeur moyenne et l'écart-type de la contrainte équivalente pour chaque grain, ainsi que la valeur moyenne de celles-ci sur l'ensemble de l'agrégat. On définit le biais numérique de discrétisation  $B(X, d)$  d'une grandeur  $X$  à partir de la relation III.5 comme l'écart relatif entre la solution estimée pour le maillage de densité  $d$  et le maillage le plus raffiné de densité  $d_\infty$ .

$$B(X, d) = \left| \frac{X(d) - X(d_\infty)}{X(d_\infty)} \right| \quad (\text{III.5})$$

On peut retenir de cette étude que pour le niveau de discrétisation,  $d_0$  (environ 1000 éléments par grain), utilisé dans nos calculs, le biais numérique est inférieur à 0.6% quelque soit la grandeur que l'on estime.

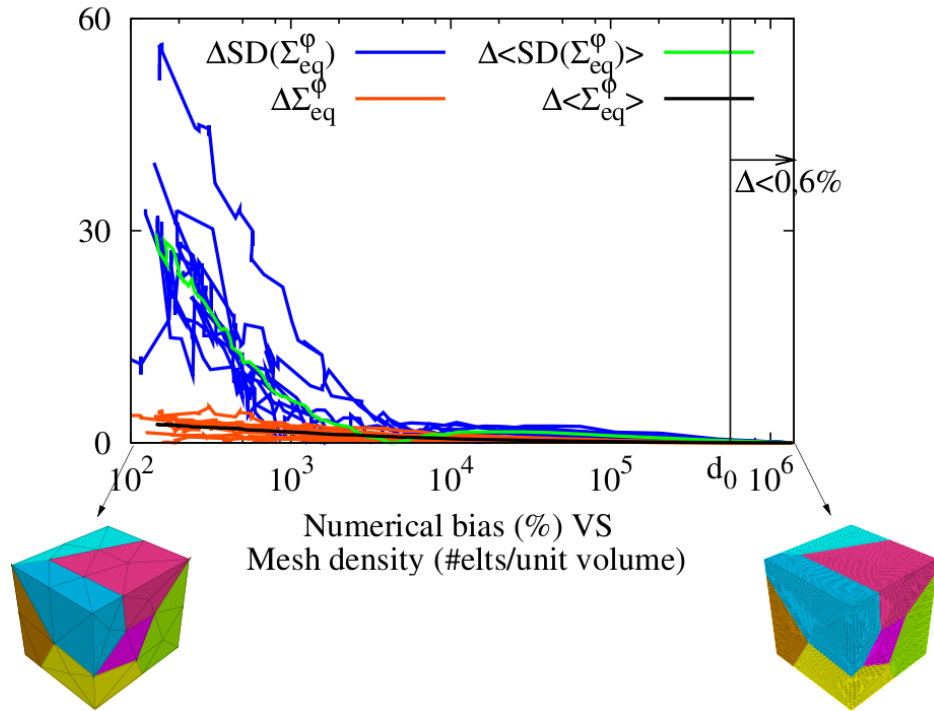


FIG. III.4 – Evolution du biais numérique de discrétisation en fonction de la densité de maillage pour le comportement effectif de l'agrégat et moyen de chaque grain et ses fluctuations (SD).

### III.2.2 Texture cristallographique

La texture cristallographique constitue une donnée essentielle pour comprendre le comportement d'un polycristal. C'est cette caractéristique des polycristaux qui conduit à une anisotropie de comportement macroscopique. Nous souhaitons connaître le nombre de réalisations nécessaires pour être représentatif d'une texture cristallographique donnée. Une approche spécifique a été développée dans cette étude pour introduire dans les agrégats une distribution des orientations qui respecte la texture cristallographique cible lorsque le nombre de réalisations augmente.

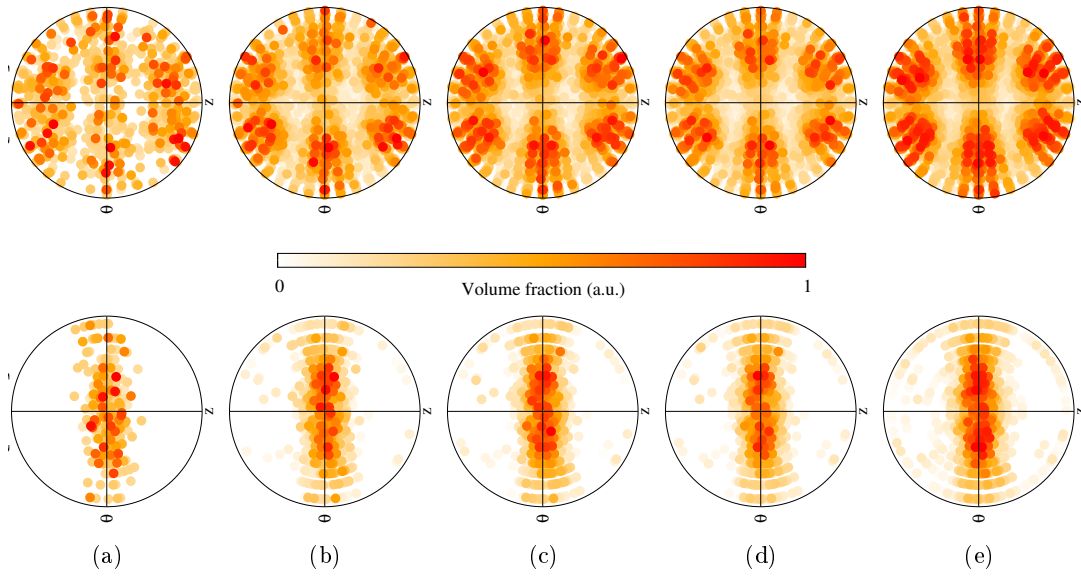


FIG. III.5 – Evolution de la texture cristallographique équivalente lorsque le nombre de réalisations augmente [(a) 1, (b) 10, (c) 30 et (d) 50 réalisations] comparée à (e) la texture cible (ici, celle d'un Zy-4 recristallisé) [en haut : figure de pôles prismatique ; en bas : figure de pôles basale].

#### III.2.2.1 Figures de pôles

Considérons  $N$  grains dans un agrégat polycristallin, l'objectif est de fixer l'orientation de chaque grain tout en respectant la distribution statistique que l'on souhaite reproduire dans nos calculs : typiquement, une texture isotrope ou bien une texture à lunette caractéristique des alliages de zirconium. Pour une texture isotrope, il suffit de tirer aléatoirement  $N$  orientations dans un ensemble isotrope (12000 orientations uniformément distribuées dans l'espace d'Euler). En revanche, pour une texture anisotrope, les orientations sont tirées aléatoirement dans un ensemble anisotrope pondéré par les fractions volumiques des orientations obtenues par une analyse RX de la texture que l'on souhaite reproduire. Comme on peut le visualiser sur les figures de pôles basale et prismatique (Fig. III.5), trente réalisations semblent suffisantes pour avoir une bonne

représentativité statistique d'une texture anisotrope. Les figures de pôles représentées ici correspondent au tracé des textures équivalentes des agrégats. On entend par là, la texture correspondant à l'ensemble des réalisations statistiques des agrégats.

Afin de quantifier cette convergence, on peut montrer que l'information que l'on tire des agrégats en terme de texture cristallographique correspond à ce que l'on cherche à reproduire simplement en calculant les facteurs de Kearns pour chaque réalisation statistique. Les facteurs de Kearns d'une texture cristallographique donnée ne constituent qu'une représentation très moyenne d'une information statistique bien plus riche. Nous pourrions conclure, à la vue du graphique III.6, que quelques réalisations suffisent à décrire correctement une texture, car pour chaque réalisation, les facteurs de Kearns sont proches des facteurs cibles. Nous mettons en place ici un indicateur quantitatif permettant de qualifier la convergence de la texture équivalente. Dans un polycristal, une phase cristallographique  $\varphi$  est caractérisée par son triplet d'angles d'Euler ( $\varphi_1, \phi, \varphi_2$ ) et sa fraction volumique  $f_\varphi$ . Nous pouvons définir deux fonctions  $D_1$  et  $D_2$  (cf Eq. III.6) qui correspondent à deux invariants de la distribution statistique. Dans le tableau III.2, on retrouve que dès que  $N > 30$ , les deux fonctions  $D_1$  et  $D_2$  convergent vers une valeur assez proche de la valeur expérimentale.

$$\begin{cases} D_1(\text{FDOC}) &= \frac{1}{N} \sqrt{\sum_{\varphi \in \text{FDOC}} f_\varphi \text{tr}[\mathcal{R}_\varphi]^2} \\ D_2(\text{FDOC}) &= \frac{1}{N} \sqrt{\sum_{\varphi \in \text{FDOC}} f_\varphi \text{tr}[\mathcal{R}_\varphi^2]} \end{cases} \quad (\text{III.6})$$

où  $\mathcal{R}_\varphi$  est la matrice de rotation associée aux angles d'Euler de la phase  $\varphi$ .

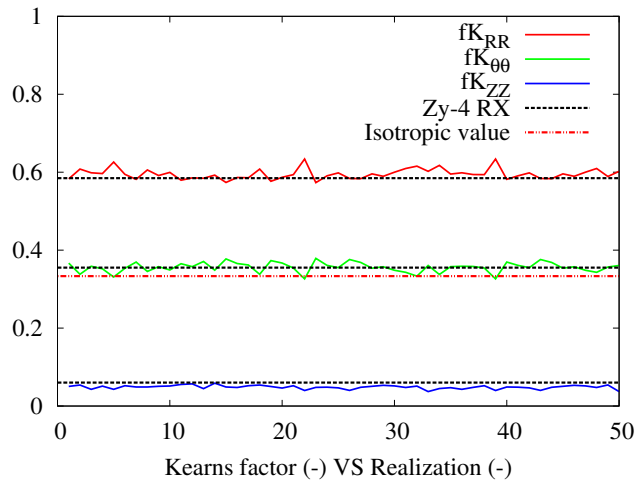


FIG. III.6 – Oscillations des facteurs de Kearns autour des valeurs cibles.

| Nombre de réalisations | $D_1$<br>num.   | $D_1$<br>exp.   | $D_2$<br>num.   | $D_2$<br>exp.   |
|------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| 1                      | 65,53 $10^{-4}$ |                 | 45,55 $10^{-4}$ |                 |
| 10                     | 27,11 $10^{-4}$ | 14,83 $10^{-4}$ | 19,54 $10^{-4}$ | 10,18 $10^{-4}$ |
| 30                     | 24,99 $10^{-4}$ |                 | 17,20 $10^{-4}$ |                 |
| 50                     | 24,98 $10^{-4}$ |                 | 17,19 $10^{-4}$ |                 |

TAB. III.2 – Indicateurs scalaires de la convergence de la texture équivalente sur la texture cible.

### III.2.2.2 Micrographie "EBSD"

Une autre manière de visualiser une texture est d'utiliser un mode de représentation de type EBSD. C'est-à-dire que l'on associe la couleur d'un grain à son orientation cristallographique sur la micrographie numérique d'un agrégat polycristallin. Pour cela, on discrétise le triangle standard en différentes zones. On souhaite mettre en avant le paramètre clé permettant d'expliquer l'activation ou non de la plasticité d'un grain de structure hexagonale ne possédant que des systèmes de glissement prismatiques : l'angle  $\Phi$  entre la direction de traction  $\underline{e}_z$  et la direction cristallographique  $\underline{c}$ . Le triangle standard est donc découpé en neuf zones (voir Fig.III.7(c)) et l'on fixe un pas de dix degrés sur l'angle  $\Phi$ . On distribue les orientations cristallines dans un agrégat contenant 729 grains en respectant une distribution isotrope (voir Fig.III.7(a)) et anisotrope (voir Fig.III.7(b)).

On réalise alors neuf tirages d'agrégats afin de distribuer les orientations cristallines dans le polycristal, et l'on observe les micrographies "EBSD" dans les deux cas : isotrope (voir Fig.III.7(d)) et anisotrope (voir Fig.III.7(e)). Comme on pouvait s'y attendre avec les figures de pôles inverses, dans le cas d'une distribution anisotrope, les micrographies "EBSD" des réalisations contiennent plutôt des couleurs chaudes car l'ensemble anisotrope dans lequel sont tirées les orientations est excentré vers les grands angles  $\Phi$ . On trouve alors des micrographies numériques qui ressemblent à la micrographie EBSD expérimentale présentée sur la figure II.1(a). Au contraire, pour une distribution isotrope, les micrographies sont multicolores, résultat d'une distribution uniforme (c'est-à-dire isotrope) des orientations cristallines présentes dans l'ensemble de départ.

### III.2.3 Loi de comportement

Dans tous les calculs d'agrégats réalisés dans ce chapitre, on considère que le comportement viscoplastique est contrôlé uniquement par les glissements prismatiques. Le tenseur d'orientation  $\underline{\underline{\mu}}^s$  d'un système de glissement prismatique  $s$  caractérisé par sa normale  $\underline{n}^s$  et sa direction d'écoulement  $\underline{m}^s$  est classiquement obtenu par le produit tensoriel symétrisé III.7.

$$\underline{\underline{\mu}}^s = \frac{1}{2} (\underline{n}^s \otimes \underline{m}^s + \underline{m}^s \otimes \underline{n}^s) \quad (\text{III.7})$$

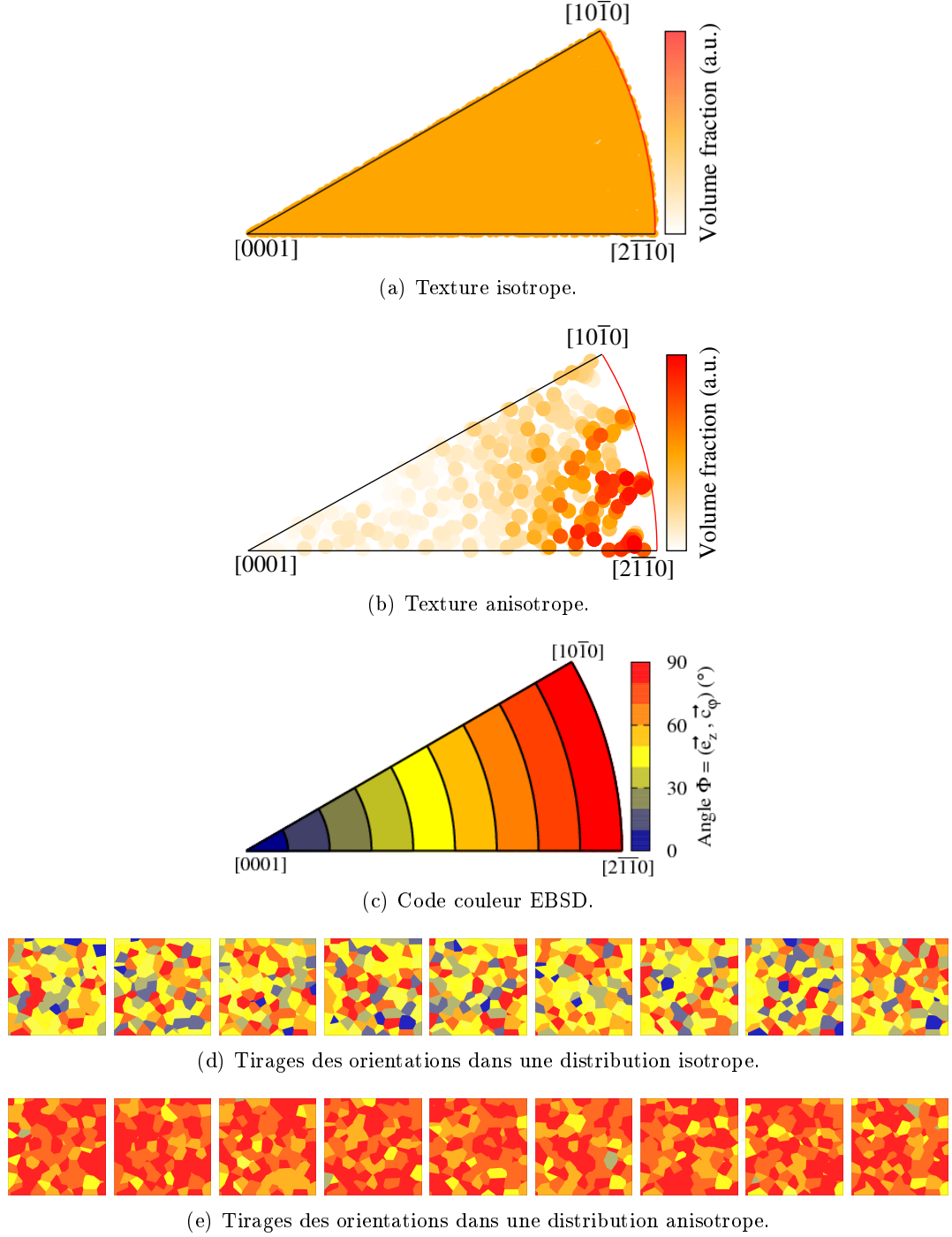


FIG. III.7 – Ensembles (a) isotrope et (b) anisotrope d'orientations cristallines dans lesquels on effectue les tirages statistiques. Dans les micrographies "EBSD", la couleur de chaque grain est associée à son orientation cristalline représentée dans le triangle standard (c). On les représente dans les cas (d) isotrope et (e) anisotrope (vue en coupe d'un agrégat contenant 729 grains).

La cission résolue  $\tau^s$  qui s'applique sur le système  $s$  est obtenue en projetant le tenseur des contraintes grâce au tenseur d'orientation  $\underline{\underline{\mu}}^s$  :

$$\tau^s = \underline{\underline{\sigma}}^g : \underline{\underline{\mu}}^s \quad (\text{III.8})$$

Dans ce modèle de viscoplasticité cristalline, la loi de Schmid est utilisée pour décrire l'activation du glissement. Dès que la cission  $\tau^s$  devient plus grande que la cission critique  $\tau_0$ , le glissement est activé et suit une loi issue de la théorie des processus thermiquement activés. Le taux de glissement sur le système  $s$ ,  $\dot{\gamma}^s$ , est alors donné par la relation III.9.

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}^0 \sinh \left( \frac{\tau_v^s V}{k_B T} \right) \frac{\tau_v^s}{|\tau_v^s|} \text{ avec } \tau_v^s = |\tau^s| - \tau_\mu^s \quad (\text{III.9})$$

L'augmentation des densités de dislocations est à l'origine d'un écrouissage intra-granulaire du matériau. Ce durcissement est modélisé par l'augmentation de la cission critique au cours de l'écoulement viscoplastique. Dans l'équation (III.9),  $\tau_v^s$  est la contribution visqueuse de la cission appliquée. L'écrouissage est régi par l'évolution de la densité de dislocations suivant la loi d'Orowan. Dans ce modèle de comportement, l'auto-écrouissage et l'écrouissage latent sont pris en compte et leur contribution relative est gérée par le paramètre  $\eta$ .

$$\tau_\mu^s = \tau_0 + \alpha \mu b \sqrt{\eta \sum_{u \in S} \rho^u + (1 - \eta) \rho^s} \quad (\text{III.10})$$

Finalement, l'évolution de la densité de dislocations est gérée par un bilan entre production et annihilation des dislocations grâce à la l'équation III.11. Physiquement, le terme de production est relié à un mécanisme d'émission de boucles de dislocations par des sources de type Frank et Read, alors que l'annihilation des dislocations est favorisée par les mécanismes de glissement dévié.

$$\dot{\rho}^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b} \left( \frac{\sqrt{\sum \rho^s}}{K} - 2y\rho^s \right) \quad (\text{III.11})$$

Le tenseur des vitesses de déformation  $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp}$  s'obtient en sommant l'ensemble des contributions des systèmes de glissement *via* la relation III.12.

$$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp} = \sum_{s \in S} \dot{\gamma}^s \underline{\underline{\mu}}^s \quad (\text{III.12})$$

Dans cette loi de comportement, huit paramètres matériau  $(E, \nu, \tau_0, \dot{\gamma}^0, \alpha, K, y, \eta)$  sont nécessaires pour décrire le comportement du monocristal. L'élasticité isotrope est caractérisée par le module de Young ( $E$ ) et le coefficient de Poisson ( $\nu$ ). Les paramètres que nous avons retenus pour ce modèle sont définis dans le tableau IV.9. Ils correspondent au comportement à température ambiante d'un alliage de zirconium recristallisé. Le comportement décrit par les équations précédentes a été introduit dans le code EF ABAQUS *via* un sous-programme UMAT (User-MATerial).

| Paramètre                             | Symbole          | Unité    | Valeur      |
|---------------------------------------|------------------|----------|-------------|
| Module de Young                       | E                | GPa      | 80          |
| Coefficient de Poisson                | $\nu$            | -        | 0.37        |
| Norme du vecteur de Burgers           | b                | nm       | 0.343       |
| Volume d'activation                   | V                | $b^3$    | 70          |
| Terme pré-exponentiel                 | $\dot{\gamma}^0$ | $s^{-1}$ | $1.10^{-9}$ |
| Cission critique                      | $\tau_0$         | MPa      | 20          |
| Force d'obstacle                      | $\alpha$         | -        | 0.14        |
| Libre parcours moyen des dislocations | K                | -        | 1.8         |
| Distance d'annihilation               | y                | b        | 4           |
| Paramètre d'écrouissage latent        | $\eta$           | —        | 0.1         |

TAB. III.3 – Paramètres matériau utilisés pour décrire le comportement EVP des grains.

### III.2.4 Chargement mécanique

Il existe de nombreuses possibilités pour imposer des conditions aux limites sur les bords d'un agrégat. Les plus couramment rencontrées sont les conditions homogènes au contour et les conditions périodiques. Dans notre étude, nous avons choisi d'appliquer des conditions aux limites mixtes qui portent à la fois sur le déplacement et le vecteur contrainte. Ce type de conditions aux limites présente l'avantage d'être plus souple par rapport aux conditions homogènes, et ainsi de limiter les effets de bord sur le calcul des champs moyens dans le grain central.

Si l'on note  $\underline{U}$  le déplacement,  $\underline{\Sigma}$  le vecteur contrainte et  $\underline{n}$  la normale sortante, les conditions aux limites peuvent se formaliser de la manière suivante :

$$\text{Sur } \partial\Omega \quad \begin{cases} \underline{U} \cdot \underline{n} &= \delta_d^n \\ \underline{\Sigma} \cdot \underline{n} \cdot \underline{t} &= 0 \quad \forall \underline{t} \perp \underline{n} \end{cases} \quad (\text{III.13})$$

où  $\delta_d^n$  est le déplacement normal imposé et peut être exprimé à partir de la relation III.14.

$$\delta_d^n = \underline{\underline{E}}^d \underline{X} \cdot \underline{n} \quad (\text{III.14})$$

avec  $\underline{X}$  le vecteur position et  $\underline{n}$  la normale.

Dans notre étude, nous nous sommes focalisés sur des chargements mécaniques déviatoriques car l'élasticité des grains est isotrope donc homogène\*. Deux sollicitations sont retenues pour nos calculs, un chargement en traction isochore et un chargement en cisaillement pur. Le déplacement normal est piloté à partir d'un tenseur déformation  $\underline{\underline{E}}^d$  qui peut s'écrire :

$$\underline{\underline{E}}^d = E_0(t) \{2\mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3 - (\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2)\} \quad (\text{III.15})$$

---

\*En effet, si on impose une sollicitation hydrostatique à l'agrégat, on obtient une solution uniforme en contrainte et en déformation



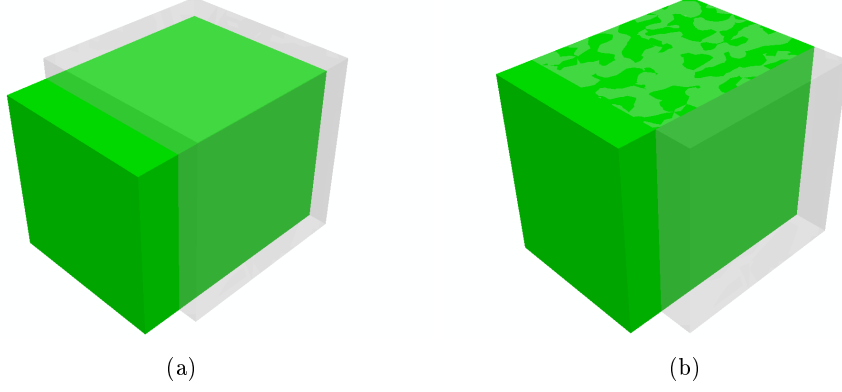


FIG. III.8 – (a) Traction isochore et (b) cisaillement pur\*.

pour le chargement en traction isochore et :

$$\underline{\underline{E}}^d = E_0(t) \{ \underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1 - \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3 \} \quad (\text{III.16})$$

pour le chargement en cisaillement pur.

Ces chargements déviatoriques sont distincts comme le montrent les valeurs des deux premiers invariants du tenseur des déformation  $E_{eq}$  et  $E_3$  calculées à partir des relations III.17.

$$E_{eq} = \sqrt{\frac{2}{3} \text{tr} \underline{\underline{E}}^2} \quad \text{et} \quad E_3 = \sqrt[3]{\frac{4}{3} \text{tr} \underline{\underline{E}}^3} \quad (\text{III.17})$$

| Invariants        | $E_{eq}$                   | $E_3$ |
|-------------------|----------------------------|-------|
| Cisaillement pur  | $\frac{2}{\sqrt{3}}  E_0 $ | 0     |
| Traction isochore | $ E_0 $                    | $E_0$ |

TAB. III.4 – Invariants des chargements retenus pour les calculs.

On s'aperçoit alors que ces deux chargements se différencient uniquement par le troisième invariant. Si on applique ces chargements sur un cube homogène, on obtient les déformées<sup>†</sup> représentées sur les figures III.8(a) et III.8(b).

---

<sup>†</sup>Pour la visualisation, les déformées ont été amplifiées d'un facteur 200.

### III.3 Estimation statistique du comportement moyen d'une phase

#### III.3.1 Approche auto-cohérente

Dans l'approche auto-cohérente classique, la notion de grains est remplacée par le concept de phase cristalline qui regroupe l'ensemble des grains de même orientation cristallographique. Une phase est donc caractérisée par son orientation cristallographique et sa forme (qui correspond à la forme moyenne des grains appartenant à la phase). Dans le cas d'un alliage recristallisé, la géométrie de chaque phase est décrite par une sphère. En considérant que chaque phase est plongée dans le MHE, le comportement macroscopique du polycristal est obtenu en moyennant l'ensemble des comportements locaux sur la texture cristallographique. Une représentation schématique de cette approche est proposée sur la figure III.9.

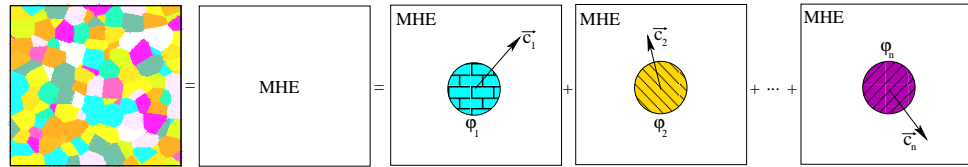


FIG. III.9 – Représentation schématique de l'approche auto-cohérente du comportement d'un polycristal [Zaoui 90].

#### III.3.2 Description de l'estimateur

Dans nos calculs d'agrégats, le grain central, noté GC, va jouer un rôle particulier. Comme il s'agit du grain le plus éloigné de la surface libre, il est le moins sensible aux conditions aux limites. L'objectif est de construire un estimateur statistique du comportement mécanique moyen d'une phase d'orientation cristallographique donnée  $\varphi$ .

Tout d'abord, on fixe l'orientation cristallographique du GC correspondant à la phase  $\varphi$  dont on souhaite estimer la réponse moyenne en sélectionnant une des orientations décrites dans le tableau III.6. Ensuite, on tire les orientations des autres grains suivant une distribution isotrope (tirage aléatoire) ou bien anisotrope (tirage distribué dans une FDOC anisotrope). Enfin, on impose aux bords du cube unitaire une sollicitation macroscopique. Au cours de cette "expérimentation numérique", on estime la moyenne et les fluctuations des champs mécaniques (contrainte et déformation) du GC.

Les champs mécaniques ainsi obtenus sont ceux d'un grain de forme polyédrique (forme de la cellule de Voronoï associé au GC) plongé dans un environnement qui ne possède pas encore les propriétés du MHE à cause du faible nombre de grains en interaction avec lui. L'idée consiste à itérer ce processus suffisamment de fois pour converger

vers la solution souhaitée. Au cours de la seconde itération, on maintient l'orientation du GC, on modifie la géométrie de l'agrégat (et donc la forme du GC) et on réalise une nouvelle distribution des orientations des autres grains. On obtient alors une deuxième réalisation de la réponse moyenne de  $\varphi$ .

Après  $N$  simulations EF, on calcule la moyenne d'ensemble des réalisations des champs mécaniques moyens et de leurs fluctuations dans le grain central. Dans l'approche auto-cohérente à un site utilisée, la notion de phase cristalline regroupe tous les grains d'orientation cristallographique identique mais de formes et de voisinages différents. Le comportement d'une phase  $\varphi$  est donc le comportement moyen d'un ensemble de grains de même orientation ayant des formes et des voisinages différents, ce qui correspond exactement à l'estimateur que l'on propose. Un schéma de principe de cet estimateur statistique du comportement moyen d'une phase  $\varphi$  est donné Fig. III.10.

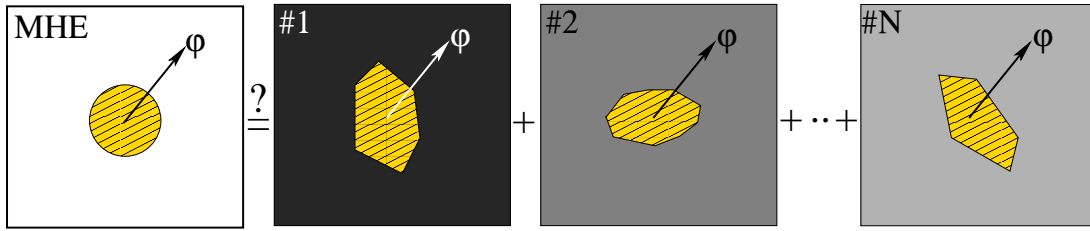


FIG. III.10 – Schéma de principe de l'estimateur statistique  $p(\varphi)$  de la réponse mécanique d'une phase  $\varphi$  plongée dans un MHE.

En considérant  $N$  réalisations et  $M_r$  points d'intégration dans le grain central de la réalisation  $r$ , la réponse d'une phase cristallographique  $\varphi$  est caractérisée par les champs moyens  $\underline{\underline{\sigma}}^\varphi$  et  $\underline{\underline{\varepsilon}}^\varphi$  et par leur fluctuation autour de ces valeurs moyennes. Cette réponse moyenne est obtenue en combinant moyenne d'espace et d'ensemble au travers des relations III.18.

$$\begin{cases} \underline{\underline{\sigma}}^\varphi = \left\langle \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_{\text{GC}_r} \right\rangle_{r \in R} = \frac{1}{N} \sum_{r=1}^N \sum_{j=1}^{M_r} \frac{V_j}{V_r} \underline{\underline{\sigma}}_j^r \\ \underline{\underline{\varepsilon}}^\varphi = \left\langle \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_{\text{GC}_r} \right\rangle_{r \in R} = \frac{1}{N} \sum_{r=1}^N \sum_{j=1}^{M_r} \frac{V_j}{V_r} \underline{\underline{\varepsilon}}_j^r \end{cases} \quad (\text{III.18})$$

Où  $V_j$  et  $V_r$  sont les volumes associés au point d'intégration  $j$  et au grain central de la réalisation  $r$ . Les quantités  $\underline{\underline{\sigma}}_j^r$  et  $\underline{\underline{\varepsilon}}_j^r$  correspondent aux valeurs des champs mécaniques pour la réalisation  $r$  au point d'intégration  $j$ . Finalement, l'estimateur statistique  $p$  du comportement d'une phase  $\varphi$  peut s'écrire de manière condensée  $p(\varphi) = \langle \langle \varphi \rangle_{\text{GC}_r} \rangle_{r \in R}$  où  $\text{GC}_r$  est le grain central de la réalisation  $r$ ,  $R$  l'ensemble des réalisations et  $\langle . \rangle_A$  l'opérateur de moyenne sur l'ensemble  $A$ .

On peut observer sur la figure III.11 le type de résultats obtenus en EVP pour le comportement d'une phase plongée dans un MHE texturé à partir de cette méthode d'estimation.

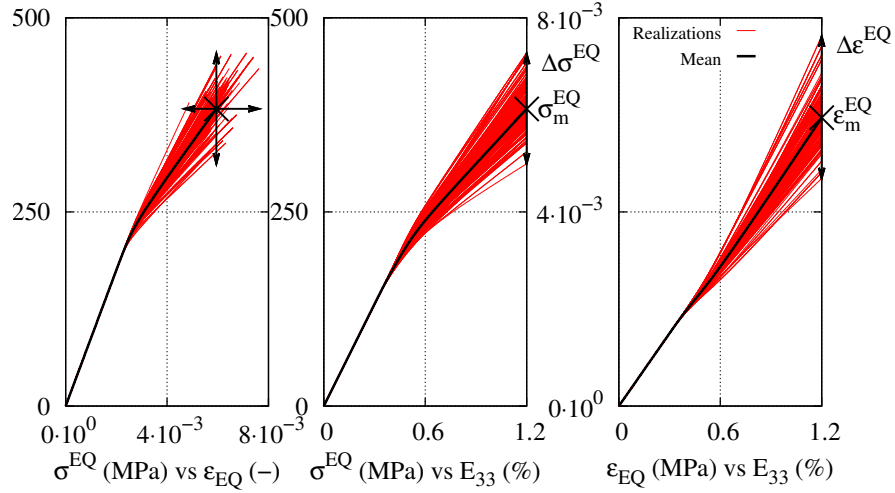


FIG. III.11 – Estimation du comportement moyen de la phase  $\varphi^{04}$  plongée dans un milieu texturé (caractéristique des alliages de zirconium recristallisés) à partir de 250 réalisations sur des agrégats contenant 512 grains.

#### III.3.3 Comportement asymptotique de l'estimateur en non-linéaire

Dans l'annexe B de ce manuscrit, nous montrons que l'estimateur  $p(\varphi)$  proposé dans ce chapitre permet de retrouver la solution théorique fournie par l'estimation auto-cohérente pour un polycristal isotrope constitué de grains avec un comportement élastique anisotrope caractéristique des métaux cubiques. L'existence d'une solution théorique dans ce contexte nous permet de constater que l'estimateur converge asymptotiquement vers la solution analytique. En revanche, dans un cadre non linéaire, cette solution théorique n'existe pas et c'est d'ailleurs pour cette raison que l'on souhaite en construire une estimation. Dans la section suivante, on souhaite démontrer que l'estimateur converge vers "une" solution et caractériser les propriétés de convergence de cet estimateur. On émet ensuite l'hypothèse que cette solution constitue une solution de référence en élastoviscoplasticité en supposant que les propriétés de l'estimateur sont conservées en non linéaire.

##### III.3.3.1 Indicateurs de convergence

Dans cette partie, on souhaite étudier numériquement le comportement asymptotique de l'estimateur  $p(\varphi)$  de la réponse d'une phase  $\varphi$  plongée dans un MHE non linéaire. Pour cela, nous mettons en place des indicateurs de convergence. Dans le but d'obtenir une visualisation de la convergence de l'estimateur, les tenseurs d'ordre 2 (contraintes, déformations et tenseurs des fluctuations associés) sont caractérisés par

un équivalent scalaire et on ne s'intéresse pas à la convergence composante par composante mais à la convergence de cet équivalent scalaire. Classiquement, on définit les grandeurs équivalentes à partir des relations III.19.

$$\begin{cases} \varepsilon_{eq} = \sqrt{\frac{2}{3} \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\varepsilon}}} \\ \sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2} \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\sigma}}} \end{cases} \quad (\text{III.19})$$

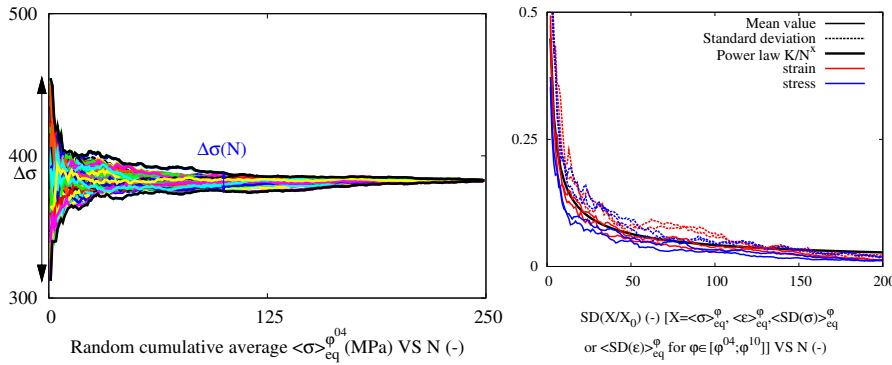


FIG. III.12 – Mise en évidence de la convergence de  $p(\varphi)$  par moyenne cumulée et vitesse de convergence des moyennes et des fluctuations de l'estimateur.

| Nombre<br>de réalisations | Précision<br>(%) |
|---------------------------|------------------|
| 5                         | 25,7             |
| 10                        | 16,9             |
| 20                        | 11,1             |
| 50                        | 6,4              |
| 100                       | 4,2              |
| 150                       | 3,3              |
| 200                       | 2,8              |

TAB. III.5 – Evolution de la précision de l'estimation avec le nombre de réalisations.

La convergence de l'estimateur peut être analysée par le biais de moyennes cumulées. Sur le graphique de la figure III.12, on trace autant de moyennes cumulées que de réalisations (250 dans ce cas) en imposant pour chaque courbe  $\#i$  et pour  $N = 1$  la valeur de la contrainte équivalente de la réalisation  $\#i$ . Cette condition nous permet de conserver une information pertinente puisque pour  $N = 1$ , on retrouve sur le graphique III.12, l'écart  $\Delta\sigma$  entre la réalisation la plus raide et la réalisation la plus souple qui est une caractéristique de l'hétérogénéité de comportement des grains appartenant à une même phase cristallographique. On voit apparaître sur ce graphique un cône de convergence dont l'amplitude  $\Delta\sigma(N)$  décroît avec le nombre de réalisations. Si on trace l'évolution de cette amplitude rapportée à la valeur moyenne en fonction de  $N$  pour les

valeurs moyennes et les fluctuations associées (cf figure III.12), on caractérise cette fois-ci la vitesse de convergence de notre estimateur  $p$ . On peut montrer que si les réalisations sont indépendantes, cette vitesse de convergence doit suivre une loi en  $1/\sqrt{N}$ . A cause du nombre fini de réalisations, nous trouvons un exposant de vitesse de convergence légèrement différent et proche de 0,6. D'après le tableau III.5, on peut conclure *via* ces indicateurs que l'estimateur fournit une solution convergée avec une précision meilleure que 5% (précision calculée par rapport à la solution estimée à partir de l'ensemble des réalisations...) lorsque le nombre de réalisations est supérieur à 100.

#### III.3.3.2 Impact de la texture sur la convergence de l'estimateur

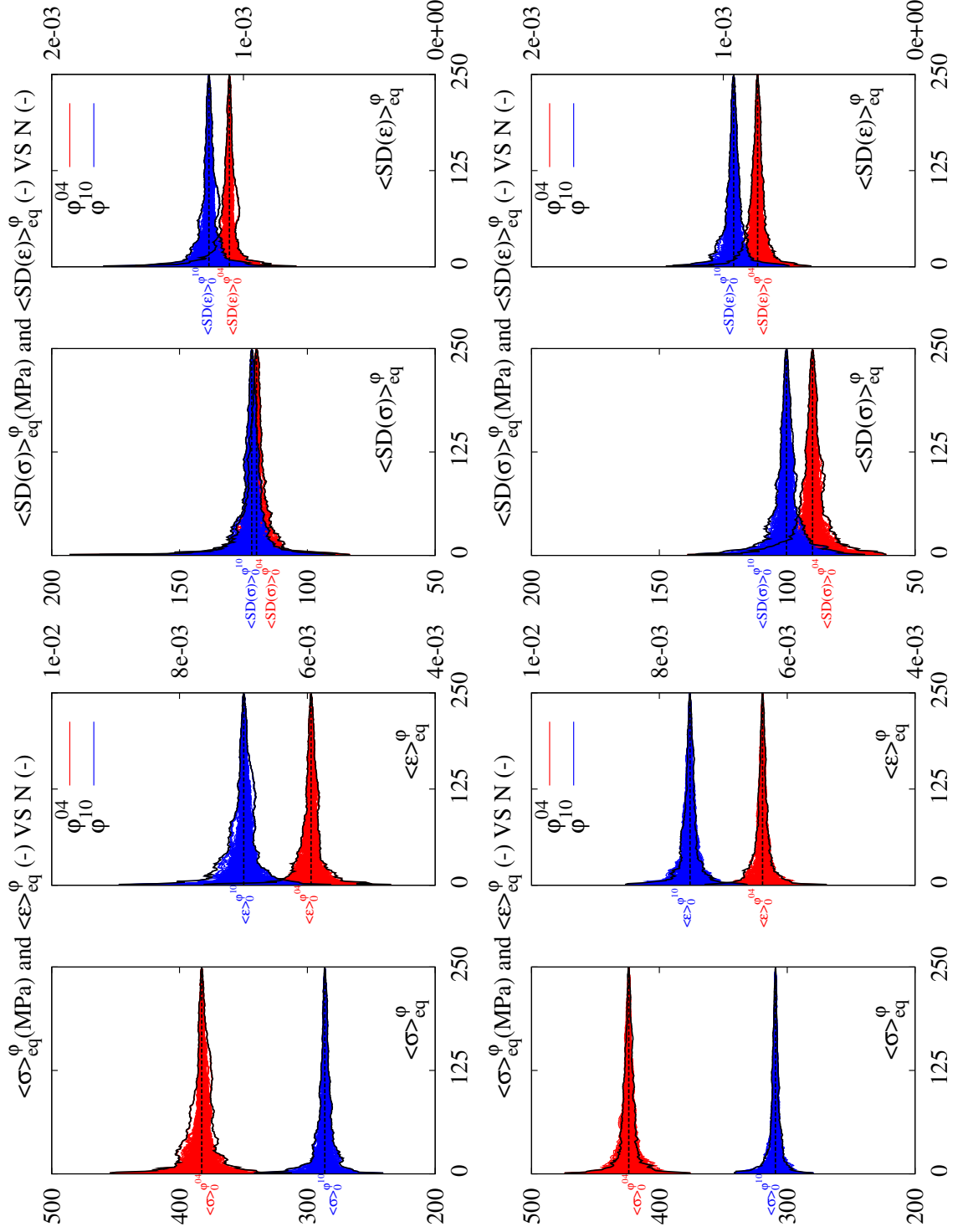
Pour analyser l'impact de la texture cristallographique sur la convergence de l'estimateur, des calculs en traction isochore sur des agrégats contenant 512 grains ont été réalisés. On analyse dans cette partie le comportement des phases  $\varphi^{04}$  et  $\varphi^{10}$  placées en position centrale dans les agrégats. On ne se préoccupe pas de l'effet de forme et on se place à maillage imposé. Environ 250 calculs ont été réalisés pour chaque phase et pour une texture isotrope et une texture anisotrope représentative des textures de gainage du Zy-4 recristallisé. Pour chaque réalisation du comportement d'une phase, on enregistre à la fin de "l'essai numérique" les champs mécaniques moyens et leurs fluctuations moyennes *via* leur écart-type<sup>‡</sup>.

On représente sur les graphiques de la figure III.13 les courbes de convergence des champs mécaniques moyens et de leur écart-type obtenues pour les 2 phases plongées dans un MHE isotrope et anisotrope. Il ressort de cette analyse que la texture impacte la vitesse de convergence de l'estimateur. L'estimateur de la réponse d'une phase plongée dans un MHE texturé converge plus vite vers son estimation que dans un milieu non texturé. Ce résultat est à rapprocher du fait que dans un milieu fortement texturé, le grain central "voit" souvent les mêmes orientations dans son proche voisinage, si bien que le comportement de la phase peut être estimé de façon satisfaisante à partir d'un nombre plus restreint de réalisations que dans un milieu isotrope où toutes les orientations sont équiprobables. On peut noter de plus que pour les 2 phases analysées, la réponse estimée est plus raide (niveau de contrainte plus élevé et niveau de déformation plus faible) dans un milieu texturé que dans un milieu isotrope mais ce résultat ne constitue pas un résultat général valide pour n'importe quelle orientation cristalline. En effet, les contraintes internes développées dans les alliages polycristallins résultent principalement des incompatibilités de déformation entre les grains. Comme il existe des orientations cristallines préférentielles dans un polycristal texturé, on peut définir une désorientation la plus probable entre l'orientation de la phase étudiée et les orientations les plus probables présentes dans le polycristal. Lorsque cette désorientation est faible, la réponse moyenne estimée dans un MHE anisotrope sera plus souple que dans un milieu isotrope et ce résultat s'inverse lorsque cette désorientation devient importante.

---

<sup>‡</sup>Les opérations de moyennes dont il est question ici sont des moyennes spatiales sur le grain central, la fluctuation moyenne caractérise l'hétérogénéité intraphase des champs mécaniques.

FIG. III.13 – Impact de la texture cristalllographique sur la convergence de l'estimateur  $p(\varphi)$ . Cas d'un MHE isotrope (figures du bas) et anisotrope (figures du haut).

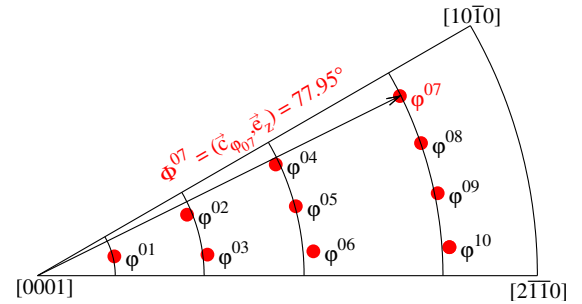


Cette analyse nous montre également que l'estimateur  $p(\varphi)$  converge en moyenne mais également en écart type. L'estimateur fournit donc une estimation statistique des moyennes des champs mécaniques et de leur moment d'ordre 2. Notre stratégie de modélisation, que nous détaillerons dans le chapitre IV, est fondée sur une approche en champ moyen mais il pourrait être intéressant de comparer les solutions fournies par les méthodes d'homogénéisation d'ordres supérieurs développées par Ponte-Castañeda [Ponte-Castañeda 92, Brenner 01] aux résultats obtenus à partir de cette estimation statistique notamment sur les fluctuations intraphases.

### III.3.4 Orientations cristallines des phases étudiées

Un des objectifs des calculs EF détaillés dans ce chapitre est de construire une base de données de référence du comportement EVP d'un certain nombre de phases cristallographiques. Les orientations de ces phases ne sont pas choisies au hasard. On souhaite construire une base représentative de l'ensemble des réponses que l'on peut trouver au sein d'un polycristal, c'est-à-dire des comportements fortement non linéaires jusqu'aux comportements quasi-élastiques. Dans le cas des comportements non linéaires, la plasticité est activée de façon précoce, principalement sous l'effet de l'orientation favorable des systèmes de glissement par rapport à la sollicitation. Dans le cas des comportements quasi-élastiques, les systèmes de glissement s'activent peu.

| Phase          | Angles d'Euler (°) |  |             |
|----------------|--------------------|--|-------------|
|                | $\varphi_1$        | $\Phi$<br>$(\vec{c}_{\varphi^{\#i}}, \vec{e}_z)$ | $\varphi_2$ |
| $\varphi^{01}$ | -149,06            | 18,01  | 164,06      |
| $\varphi^{02}$ | -157,18            | 35,81  | 172,18      |
| $\varphi^{03}$ | -142,08            | 37,82  | 157,08      |
| $\varphi^{04}$ | -160,02            | 55,49  | 175,02      |
| $\varphi^{05}$ | -150,04            | 56,31  | 165,04      |
| $\varphi^{06}$ | -140,04            | 57,97  | 155,04      |
| $\varphi^{07}$ | -161,37            | 77,95  | 176,37      |
| $\varphi^{08}$ | -154,07            | 78,14  | 169,07      |
| $\varphi^{09}$ | -146,64            | 78,52  | 161,64      |
| $\varphi^{10}$ | -138,96            | 79,12  | 153,96      |



TAB. III.6 – Orientations des phases cristallographiques étudiées et projection inverse des directions  $\underline{e}_z$  dans le triangle standard unitaire.

Le paramètre d'ordre un qui régit la plasticité d'une phase cristallographique avec trois systèmes prismatiques est l'angle entre la direction de sollicitation et l'axe  $\underline{c}$ . Afin de décrire la diversité du comportement mécanique des phases, le triangle standard est découpé en dix cases de même aire. Ainsi, on construit dix orientations cristallines en sélectionnant le centre de ces cases [Ruer 76, Vadon 81]. Comme on peut le constater sur



la projection de ces orientations dans le triangle standard (cf Fig. III.6), ce processus conduit à un pavage régulier de l'espace d'Euler. Les orientations cristallographiques des dix phases ainsi construites ( $\varphi^{\#i}, i = 1, 10$ ) sont détaillées dans le tableau III.6 et permettent d'accéder à des comportements mécaniques variés. Ces dix phases cristallines vont donc nous permettre de tester la validité des règles de changement d'échelle sur une large gamme de comportement.

### III.3.5 Impact de la forme polyédrique des grains

#### III.3.5.1 Modélisation d'une forme sphérique

Les grains constitutifs de nos agrégats sont des polyèdres. Dans notre estimateur  $p$ , la géométrie de l'agrégat est modifiée à chaque réalisation. Nous souhaiterions vérifier si ce procédé permet d'approcher une forme sphérique ou autrement dit, si la forme moyenne d'un ensemble de polyèdres équiaxes est effectivement une sphère. Nous faisons le choix de décrire la forme des grains polyédriques par leur tenseur d'inertie  $\underline{\underline{\mathcal{J}}}$ . La diagonalisation de ce tenseur nous fournit une base propre ainsi que trois valeurs propres qui définissent les moments d'inertie principaux. On en déduit alors l'ellipsoïde approchant la forme polyédrique considérée au sens de l'inertie (voir Fig. III.14(a)) en identifiant ce tenseur d'inertie avec celui d'un ellipsoïde défini par ses demi-axes  $a$ ,  $b$  et  $c$ .

L'opérateur d'inertie  $\underline{\underline{\mathcal{J}}}$  est obtenu en calculant des intégrales de volume sur l'ensemble des points de Gauss du solide polyédrique  $\Omega$ . Il est défini en tout point  $G$  à partir de la relation III.20.

$$\forall \underline{u} \in \mathbb{R}^3 \quad \underline{\underline{\mathcal{J}}}(G, \Omega) \cdot \underline{u} = \int_{M \in \Omega} \underline{GM} \wedge (\underline{u} \wedge \underline{GM}) dm \quad (\text{III.20})$$

Le tenseur d'inertie d'un ellipsoïde quelconque s'exprime simplement dans son repère propre  $\mathcal{R}'$  suivant la relation III.21.

$$\underline{\underline{\mathcal{J}}} = \frac{1}{5} M \begin{pmatrix} b^2 + c^2 & 0 & 0 \\ 0 & c^2 + a^2 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 + b^2 \end{pmatrix}_{\mathcal{R}'} \quad (\text{III.21})$$

Où  $a$ ,  $b$  et  $c$  sont les rayons principaux de l'ellipsoïde et  $M$  sa masse.

Appliquons donc cette méthode de caractérisation de forme à notre problématique. Nous avons généré plus de 1000 maillages différents contenant 343 grains chacun. Pour chaque maillage, on calcule l'ellipsoïde approchant du grain central et on déduit son tenseur d'Eshelby  $\mathbb{S}^E$ . Le tenseur d'Eshelby est simplement utilisé pour caractériser la forme de l'ellipsoïde approchant. On fixe le coefficient de Poisson de la matrice dans laquelle est plongée l'inclusion à 0.2 car dans ce cas  $2\mathbb{S}^E = \mathbb{I}$ . On peut alors calculer différents rapports d'anisotropie de ce tenseur d'ordre 4 *via* les relations III.22 et montrer que ces rapports tendent vers des ratios isotropes lorsque le nombre de réalisations  $N$  devient grand.

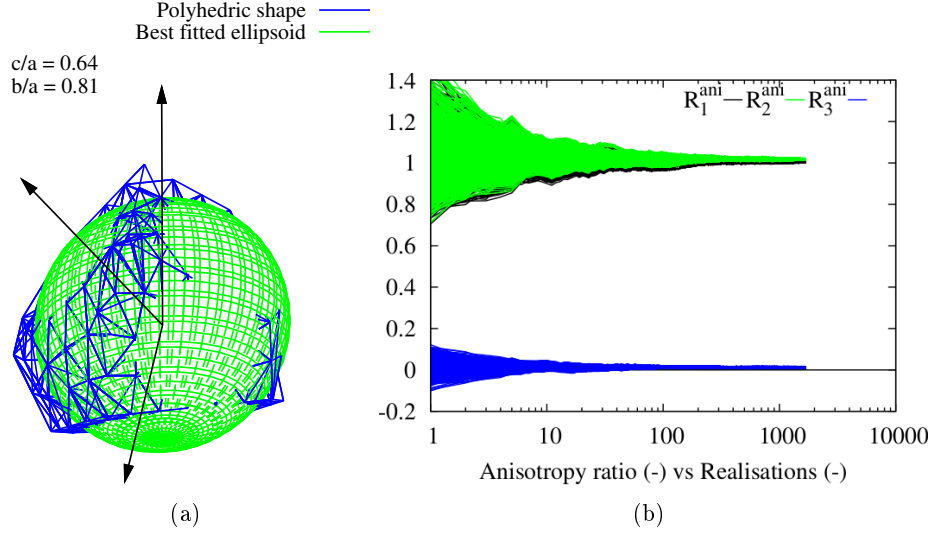


FIG. III.14 – (a) Ellipsoïde le plus approchant d'un grain de forme polyédrique au sens de l'inertie et (b) convergence de la forme moyenne d'un ensemble de polyèdres sur la forme sphérique.

$$\begin{cases} R_1^{ani} = \frac{2S_{44}^E}{S_{11}^E - S_{12}^E} \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} 1 \\ R_2^{ani} = \frac{S_{11}^E}{2S_{44}^E} \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} 1 \\ R_3^{ani} = \frac{S_{12}^E}{S_{44}^E} \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} 0 \end{cases} \quad (\text{III.22})$$

On trace alors différentes réalisations de la moyenne cumulée (de la même manière que pour les courbes de convergence de l'estimateur  $p(\varphi)$ ) de ce rapport d'anisotropie (voir Fig. III.14(b)) et on observe que ces ratios tendent vers 0 ou 1 lorsque le nombre de réalisations devient suffisant. On note qu'un ensemble de 200 polyèdres équiaxes permet de décrire avec une précision correcte une forme équivalente sphérique.

### III.3.5.2 Nécessité d'un schéma itératif sur les formes

Une étude paramétrique de l'effet de forme est proposée afin d'estimer l'impact de la forme polyédrique des grains sur les champs mécaniques moyens. Les différentes formes du GC analysées dans cette étude sont reportées sur le graphe III.15(a) au travers de leur rapports d'élancement  $c/a$  et  $b/a$  associés à leur ellipsoïde d'inertie. L'algorithme permettant de générer les microstructures numériques étant fondé sur un processus de Voronoï aléatoire, on s'aperçoit que ces rapports d'élancement sont distribués autour de l'unité, synonyme d'une forme sphérique.

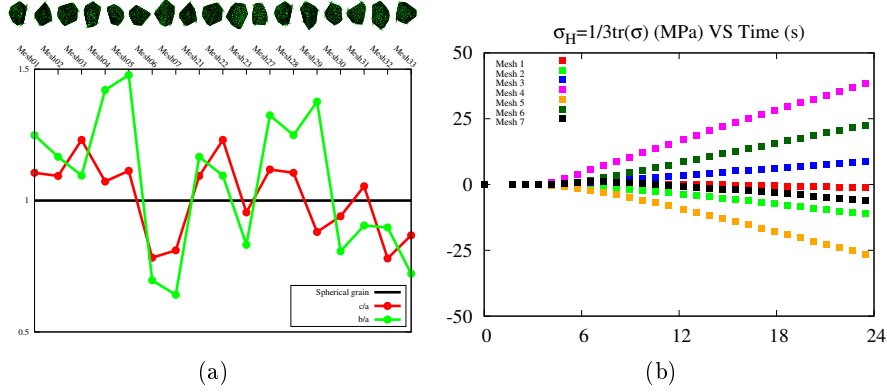


FIG. III.15 – (a) Rapport d'élancement ellipsoïdal de différentes formes de grain et (b) effet de trace dans le grain central induit par la forme polyédrique des grains.

Des calculs d'agrégats en traction isochore ont été menés jusqu'à convergence de l'estimation des champs mécaniques moyens dans la phase  $\varphi^{10}$  pour les sept premiers maillages (voir graphique III.15(a)). On représente sur le graphique de la figure III.15(b) l'évolution de la contrainte hydrostatique ( $\sigma_H$ ) en fonction du temps obtenue en moyennant plus de 100 réalisations par maillage. Lorsque la plasticité s'initie dans la phase  $\varphi^{10}$ , on obtient par l'intermédiaire de ces calculs des niveaux de contrainte hydrostatique importants alors que le chargement macroscopique est à trace nulle. On attribue alors cet effet de trace à la forme polyédrique des grains. On peut noter de plus que cet effet de trace disparaît si l'on moyenne les champs mécaniques sur l'ensemble des formes de grains. On en déduit qu'il est nécessaire d'introduire dans l'estimation des champs moyens d'une phase  $\varphi$  un schéma itératif sur les formes. Idéalement, comme proposé sur le schéma de principe III.10, il faudrait modifier pour chaque réalisation la distribution des orientations du voisinage du grain central et la géométrie de l'agrégat. On peut cependant conclure de par cette étude qu'un ensemble de sept maillages permet de gommer les effets de trace.

### III.4 Vers une règle de changement d'échelles adaptée aux polycristaux hexagonaux

Par le biais de l'estimateur  $p(\varphi)$  de la réponse moyenne d'une phase  $\varphi$  proposé dans la partie précédente, nous sommes en mesure de construire une solution de référence pour certaines des phases d'un polycristal isotrope. Nous souhaitons comparer ces estimations aux résultats fournis par trois règles de changement d'échelle (Kröner-Weng, Berveiller-Zaoui et règle en  $\beta$ ). Moyennant un nombre suffisant de réalisations et un schéma itératif sur les formes des grains centraux, il semble que l'estimateur  $p(\varphi)$  soit capable de fournir une estimation fiable des champs moyens dans les phases d'un polycristal. On ne peut pas démontrer que l'estimation non linéaire proposée ici constitue une solution de référence en élastoviscoplasticité puisqu'il n'existe pas de solution analytique. C'est la

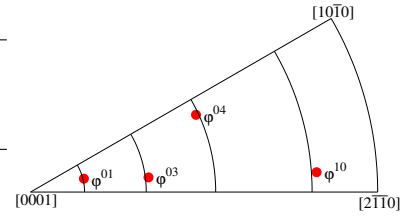
confrontation des résultats fournis par  $p(\varphi)$  avec un cas analytique en élasticité cubique (détaillé dans l'annexe B) qui nous donne une certaine confiance en cette estimation. De plus, de par le caractère réaliste des microstructures granulaires utilisées dans les calculs et des bonnes propriétés de convergence de l'estimateur  $p(\varphi)$ , on peut penser qu'il fournit une bonne estimation des champs moyens en élastoviscoplasticité dans certaines phases.

### III.4.1 Description de la base d'essais numériques de référence

La base d'essais numériques que nous allons utiliser pour tester la validité des règles de changement d'échelle est constituée d'essais de traction isochore et de cisaillement pur pour quatre phases cristallographiques. Afin de tester la capacité des règles de changement d'échelle à décrire la réponse moyenne des phases cristallographiques pour différents trajets de chargement, nous avons également estimé le comportement moyen de certaines phases pour des sollicitations avec décharge. La base de données et les orientations des phases cristallographiques analysées dans ce travail sont détaillées dans le tableau ci-dessous III.7(b). Pour plus d'informations sur les angles d'Euler associés aux phases étudiées dans cette partie, le lecteur se reportera au tableau III.6.

| Phase        |            | $\varphi^{01}$ | $\varphi^{03}$ | $\varphi^{04}$ | $\varphi^{10}$ |
|--------------|------------|----------------|----------------|----------------|----------------|
| Angle $\Phi$ |            | 18°            | 38°            | 55°            | 79°            |
| Traction     | $E_0(\%)*$ | 2,4            | 1,2            | 1,2            | 1,2            |
|              | $N(-)**$   | 7*29           | 7*27           | 7*20           | 7*20           |
|              | cyclique   | oui            | non            | non            | oui            |
| Cisaillement | $E_0(\%)*$ | 2,4            | -              | -              | 1,2            |
|              | $N(-)**$   | 7*31           | -              | -              | 7*30           |
|              | cyclique   | non            | -              | -              | oui            |

(a)
(b)



\* $E_0$  correspond à l'amplitude de déformation macroscopique imposée.

\*\* $N$  correspond au nombre de réalisations EF calculées pour estimer la réponse moyenne.

TAB. III.7 – (a) Description de la base d'essais numériques pour caractériser la réponse moyenne de quatre phases cristallographiques et (b) projection inverse de l'orientation cristallographique des quatre phases dans le triangle standard.

Etant donné que l'angle  $\Phi$  entre la direction de traction et l'axe  $c$  constitue le paramètre le plus influant sur la réponse mécanique d'une phase, nous avons sélectionné quatre orientations correspondant à des angles  $\Phi$  très différents. Le niveau maximum de déformation macroscopique  $E_0$  imposée est fixé à 1,2% pour l'ensemble des phases à l'exception de la phase  $\varphi^{01}$  pour laquelle nous avons dû augmenter le niveau de déformation ( $E_0 = 2,4\%$ ) afin d'activer la plasticité dans cette phase. Dans le but de gommer l'effet de forme évoqué lors de la caractérisation de l'estimateur  $p(\varphi)$ , et d'estimer ainsi le comportement d'une phase de forme sphérique, les moyennes ont été calculées sur sept formes de grains et une trentaine de réalisations ont été calculées par

maillage.

### III.4.2 Effet de forme

Sept maillages ont donc été sélectionnés de façon à décrire une diversité de forme du GC suffisante pour estimer en moyenne la réponse d'une phase de forme sphérique. Pour chaque maillage, nous calculons un ensemble de réalisations, ce qui nous permet d'estimer un comportement moyen avec différents voisinages associé à une forme polyédrique particulière. La référence EF que nous allons confronter par la suite aux différentes règles de transition d'échelle est calculée en moyennant l'ensemble des sept réponses estimées pour chaque forme. Etant donné qu'il n'y a pas d'effet de taille dans les calculs d'agrégats, le comportement moyen des phases est estimé à partir de la moyenne arithmétique non pondérée par le volume des GC puisque les résultats EF sont insensibles à une transformation homothétique de la géométrie.

Nous représentons sur les figures III.16 l'évolution des six composantes du tenseur contrainte avec la déformation macroscopique pour quatre phases, et pour une sollicitation de traction isochore. On observe que la dispersion des contraintes due à la forme polyédrique est fortement dépendante de l'orientation de la phase et de la composante du tenseur. Etant donné que l'élasticité est isotrope, cette dispersion n'apparaît qu'en plasticité et est d'autant plus marquée que le niveau de déformation plastique est élevé dans la phase. Il semble se dégager de ces résultats que plus la plasticité est active dans une phase, plus la dispersion de forme est importante. Sur la figure III.17, on observe un effet de trace à cause de la forme polyédrique, et ce malgré un chargement macroscopique déviatorique. En d'autres termes, la contrainte hydrostatique dans les phases est non nulle alors qu'elle l'est macroscopiquement. On représente sur cette figure l'évolution de cette contrainte en fonction de la déformation macroscopique pour différentes phases cristallographiques et pour sept maillages, ainsi que la moyenne sur les sept maillages. Il en ressort que la moyenne sur sept formes différentes permet de compenser l'effet de trace dans le GC. Il serait toutefois préférable d'introduire un nouveau maillage à chaque nouvelle réalisation dans le processus d'estimation EF de la réponse moyenne d'une phase. Le critère de convergence en forme de l'estimation EF pourrait alors porter sur une contrainte hydrostatique moyenne à ne pas dépasser.

### III.4.3 Confrontation des résultats aux modèles de la littérature

Dans cette partie, nous souhaitons confronter la réponse moyenne des quatre phases cristallographiques décrites dans le tableau III.7 obtenue par EF aux résultats issus des modèles de Kröner-Weng (KW) et de Berveiller-Zaoui (BZ). Nous représentons sur les figures III.18, III.19 et III.20, toutes les composantes des tenseurs contrainte et déformation pour chaque phase cristallographique en fonction de la déformation macroscopique : déformation suivant l'axe de traction pour les essais de traction isochore et déformation de cisaillement pour les essais de cisaillement pur.

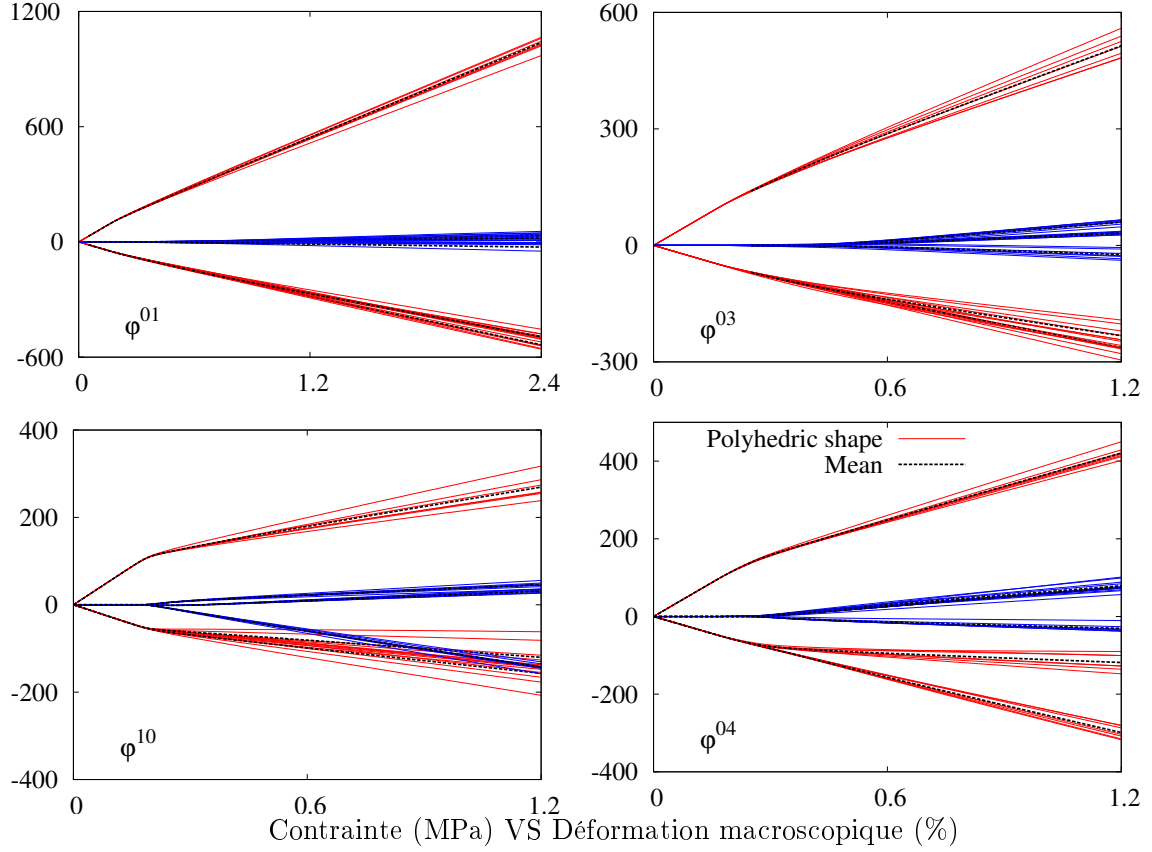


FIG. III.16 – Impact de l'effet de forme sur la dispersion en contrainte pour trois phases cristallographiques et pour un essai de traction isochore (les 6 composantes du tenseur contrainte sont représentées sur chaque graphe en fonction la déformation macroscopique [en bleu : composantes hors diagonale et en rouge : composantes diagonale]).

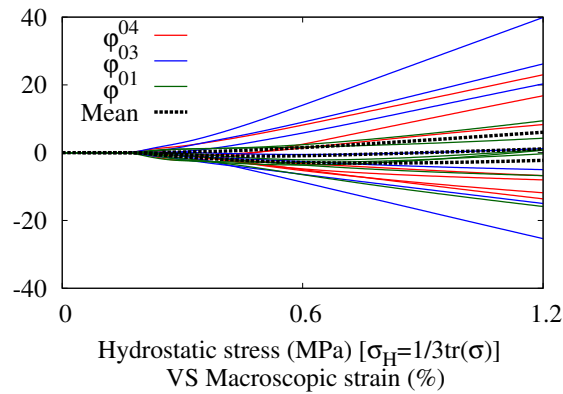


FIG. III.17 – Compensation de l'effet de trace en moyennant sur différentes formes polyédriques pour un essai de traction isochore.

Pour les essais de traction isochore, on peut remarquer que plus l'angle  $\Phi$  est important, plus la plasticité est activée de façon précoce dans la phase. En effet, les termes de cisaillement des tenseurs contrainte et déformation n'apparaissent qu'en plasticité puisque l'élasticité est isotrope et homogène dans le polycristal. Cet effet est tellement marqué que pour la phase  $\varphi^{01}$  ( $\Phi = 18^\circ$ ), nous avons dû doubler le niveau de déformation macroscopique imposé afin de développer suffisamment de plasticité dans cette phase. En comparant les résultats obtenus en cisaillement et en traction isochore sur la phase  $\varphi^{10}$ , on remarque de plus que la plasticité est activée pour un niveau de déformation macroscopique plus faible.

Nous pouvons constater sur ces figures que les premiers stades de l'écoulement VP des phases sont parfaitement décrits par le modèle de Kröner et *a fortiori* par le modèle BZ car pour les faibles niveaux de déformation plastique, le facteur d'accommodation introduit par Zaoui est proche de 1. Ce constat provient du fait que dans les premiers instants de l'écoulement des phases, la matrice accommode les incompatibilités de déformation élastiquement ce qui constitue l'hypothèse fondatrice du modèle de Kröner.

En revanche, lorsque le niveau de déformation augmente, on voit apparaître des écarts entre l'estimation EF et les modèles KW et BZ. Dans la plupart des cas, le modèle BZ prévoit une réponse mécanique trop souple par rapport à la référence EF alors qu'au contraire le modèle KW prédit une réponse trop raide du comportement des phases. De plus, nous pouvons noter que lorsque la réponse EF n'est pas bornée par les modèles KW et BZ, cela concerne les composantes des tenseurs de faibles intensités.

Un résultat de ces calculs est donc que le modèle BZ ne constitue pas une solution de référence du comportement moyen des phases puisqu'il montre des écarts, parfois importants, par rapport à la solution EF. Dès lors, le recalage de la règle en  $\beta$  sur le modèle BZ pose des problèmes de principe dans le cas des polycristaux hexagonaux avec uniquement 3 systèmes de glissement prismatique.

On remarque en outre sur les essais de traction isochore que les modèles de transition d'échelles BZ et KW éprouvent plus de difficultés à reproduire les résultats EF pour les phases "raides" ayant un axe  $c$  proche de l'axe de traction que pour les phases plus "souples" comme la phase  $\varphi^{10}$  par exemple. Ceci provient du fait que les phases "raides" activent peu de plasticité puisqu'elles sont défavorablement orientées pour le glissement prismatique. Ces phases ne peuvent donc pas accommoder les incompatibilités de déformation intergranulaire. Or, d'après les résultats obtenus pour la phase  $\varphi^{01}$ , celle-ci plastifie tout de même (voir Fig. III.20) et ce malgré son orientation défavorable pour le glissement. On explique cette observation numérique par le fait que, indépendamment de son orientation cristallographique, les fluctuations du voisinage d'un grain permettent de "déposer" du cisaillement sur les plans prismatiques et donc d'apporter une force motrice à l'écoulement EVP de cette phase.

Dans ce contexte, nous aimerions proposer un modèle qui permette de trouver un

compromis entre le modèle KW et le modèle BZ. C'est dans ce cadre que nous souhaitons tester la validité de la règle en  $\beta$  et en proposer une évolution qui permette de mieux décrire les résultats EF. Nous allons montrer dans ce qui suit que la flexibilité du modèle en  $\beta$  apportée par l'introduction de paramètres ajustables permet de trouver un bon compromis. La perte de l'auto-cohérence *stricto sensu* dans le modèle en  $\beta$  est ici pleinement assumée puisque on assure, pour les orientations des phases appartenant à la base de données, une bonne description des champs locaux.

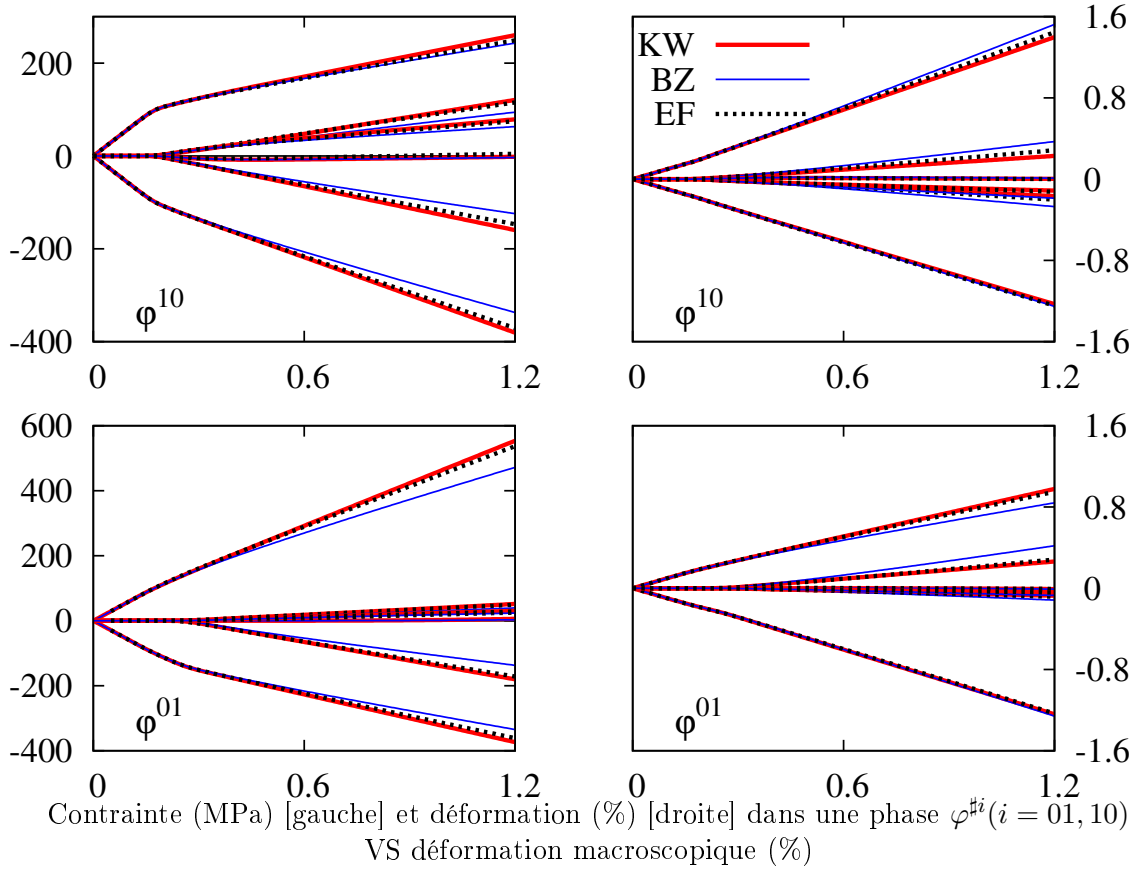


FIG. III.18 – Comparaison entre les modèles KW et BZ et l'estimation EF de la réponse moyenne de deux phases pour un agrégat sollicité en cisaillement pur (Les 6 composantes des tenseurs déformation et contrainte sont représentées).



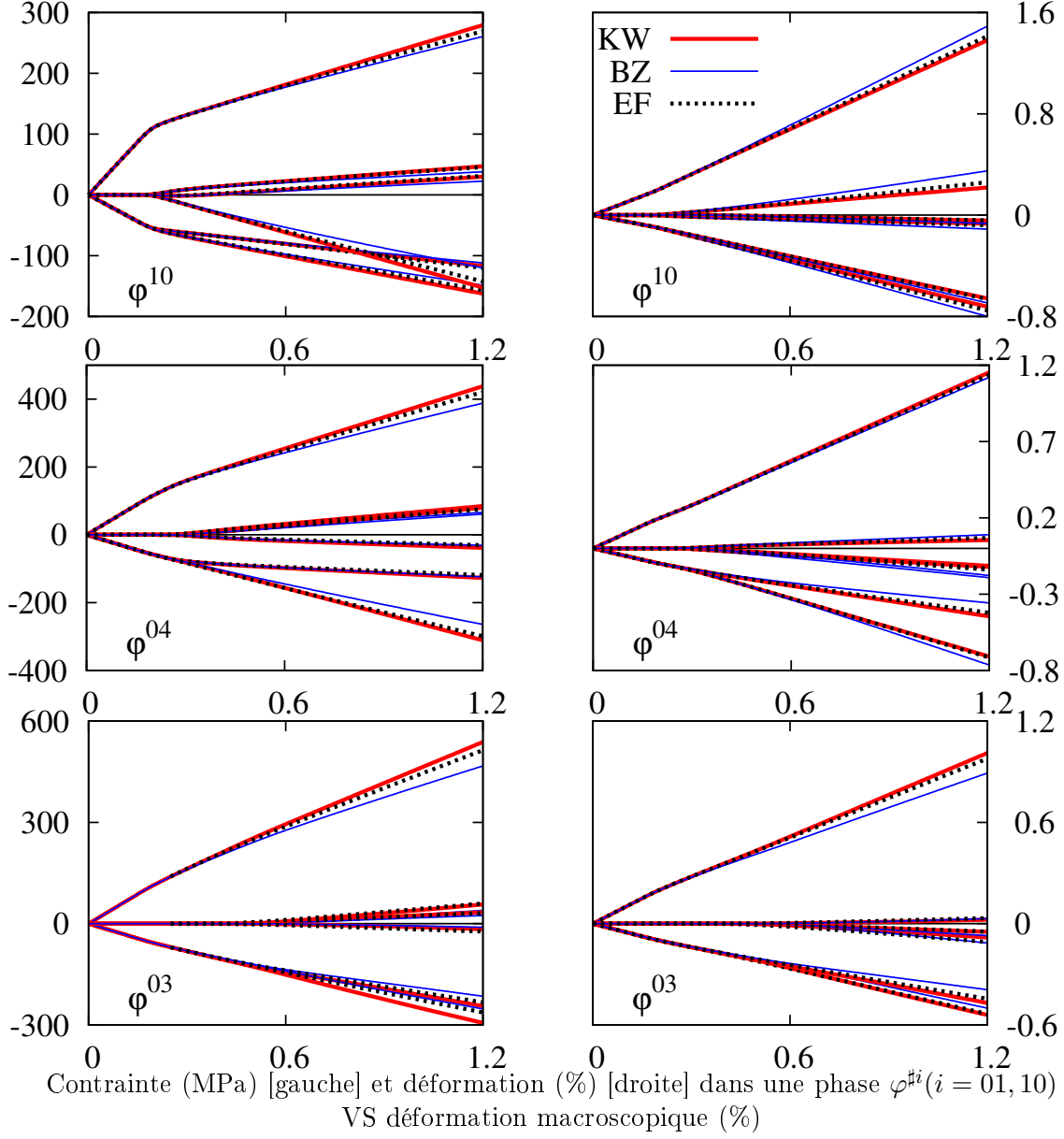


FIG. III.19 – Comparaison entre les modèles KW et BZ et l'estimation EF de la réponse moyenne de trois phases pour un agrégat sollicité en traction isochore (Les 6 composantes des tenseurs déformation et contrainte sont représentées).

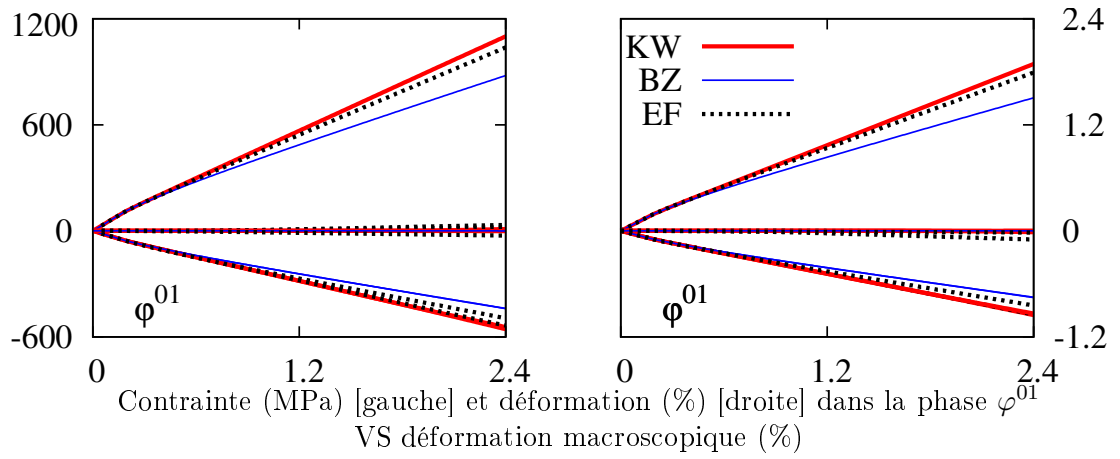


FIG. III.20 – Comparaison entre les modèles KW et BZ et l'estimation EF de la réponse moyenne de la phase  $\varphi^{01}$  pour un agrégat sollicité en traction isochore (Les 6 composantes des tenseurs déformation et contrainte sont représentées).

### III.4.4 Estimation des paramètres ajustables

#### III.4.4.1 Procédure d'identification

L'identification des paramètres ajustables  $D$  et  $\delta$  de la règle en  $\beta$  (cf. Eq.I.18) est réalisée grâce au logiciel SiDoLo. Ce logiciel développé par Pilvin [Pilvin 83] permet d'identifier les paramètres d'un modèle sur la base de la minimisation d'une fonction coût  $\mathcal{L}(A)$ . Le logiciel utilise pour cette résolution un algorithme hybride qui combine trois techniques classiques de minimisation, méthodes du gradient, de Newton-Raphson et de Levenberg-Marquardt. La fonction coût est définie à partir de l'ensemble des fonctions coût  $\mathcal{L}_n(A)$  ( $n \in \llbracket 1, N \rrbracket$ ) calculées pour les  $N_e$  "essais" appartenant à la base d'identification à partir des relations III.23 et III.24.

$$\mathcal{L}(A) = \sum_{n=1}^{N_e} \mathcal{L}_n(A) \quad (\text{III.23})$$

avec :

$$\mathcal{L}_n(A) = \sum \left( \frac{Z_{exp} - Z_{sim}(A)}{\Delta Z_n} \right)^2 \quad (\text{III.24})$$

où  $Z_{exp} - Z_{sim}(A)$  est l'écart entre les variables observées et simulées et  $\Delta Z_n$  est un facteur de pondération de l'essai  $n$  qui s'exprime par la relation III.25.

$$\Delta Z = \Delta Z_0 + \delta Z_0 |Z_{exp}| \quad (\text{III.25})$$

avec  $\Delta Z_0$  un terme de pondération absolue et  $\delta Z_0$  un terme de pondération relatif.

Dans notre cas, les variables observables sont les six composantes du tenseur des contraintes ( $Z = \langle \sigma_{ij} \rangle^\varphi$ ) et la base d'identification est constituée des six "essais" ( $N_e = 6$ ) décrits dans le tableau III.7 obtenus par la procédure d'estimation statistique proposée dans ce chapitre. On fait ici le choix d'identifier le modèle uniquement sur les contraintes car les essais sont pilotés en déformation et la réponse moyenne des phases en déformation est globalement bien simulée par le modèle en  $\beta$ . Afin de rendre compte de la dispersion des contraintes causée par les effets combinés de forme et de voisinage, nous proposons d'assimiler le terme de pondération relatif à l'écart-type des contraintes dans la procédure d'identification. Comme nous pouvons le constater sur la figure III.21(a), la réponse moyenne de la phase est très influencée par la réalisation la plus raide (pour cette composante du tenseur). La prise en compte de la dispersion des contraintes va nous permettre de moduler le poids des essais dans la procédure d'identification. Une composante très dispersée pèsera ainsi moins "lourd" qu'une composante faiblement dispersée dans le processus de recalage de la règle de changement d'échelle. On constate sur les graphiques de la figure III.21(b) par exemple, que les composantes de faible intensité ont une dispersion relative plus grande que les composantes de forte intensité.

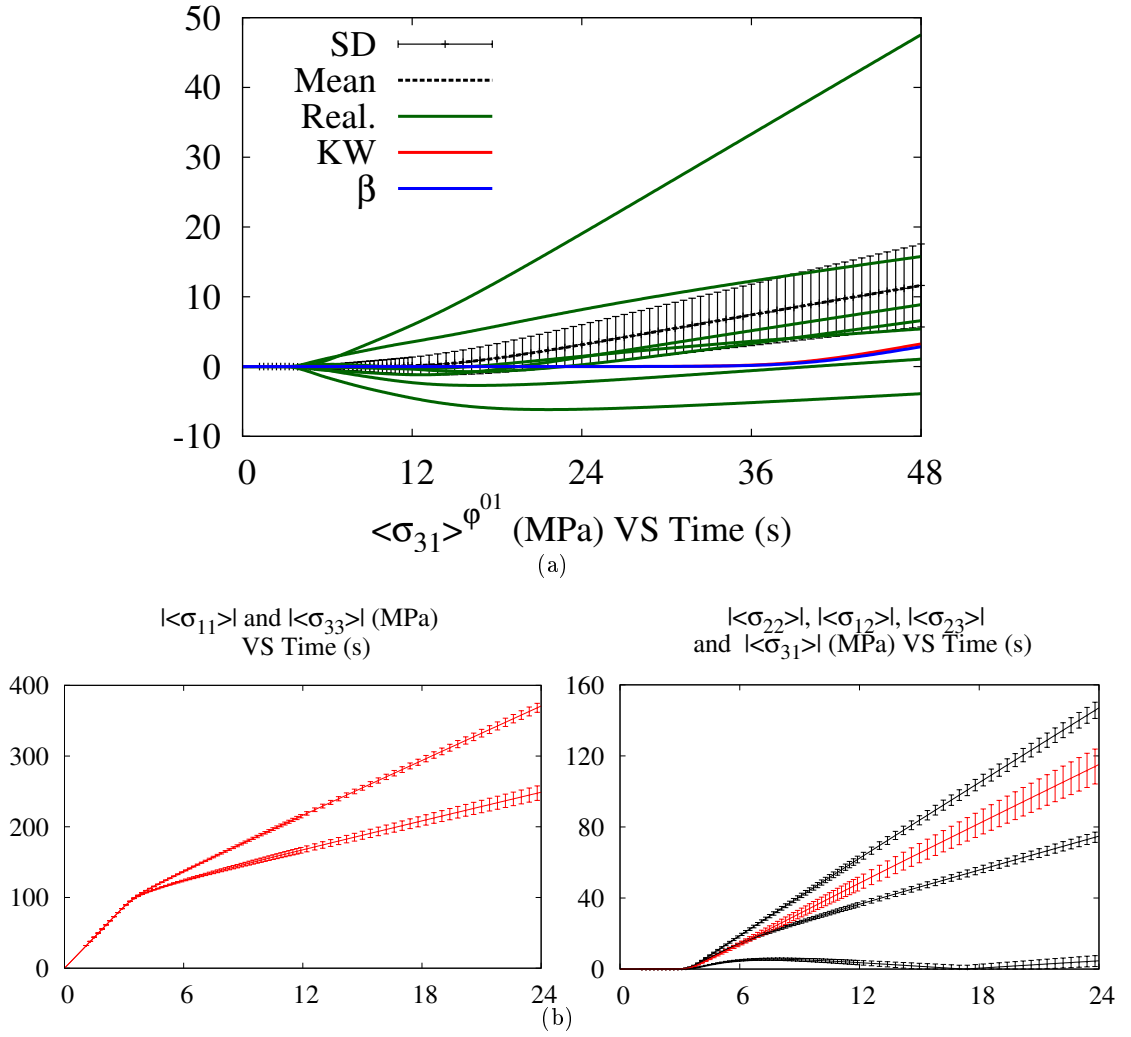


FIG. III.21 – (a) Evolution de la contrainte  $\sigma_{31}$  au cours du temps pour la phase  $\varphi^{01}$  pour les sept maillages, en moyenne et simulée par les modèles KW et  $\beta$  et (b) mise en évidence d'une dispersion relative des contraintes dépendante de la composante sur un essai de cisaillement pur sur la phase  $\varphi^{10}$ .

III.4.4.2 Identification du modèle en  $\beta$ 

L'identification du modèle en  $\beta$  en suivant la procédure d'identification décrite dans la section précédente conduit à une estimation des paramètres ajustables :  $D = 139$  et  $\delta = 0,785$ . On représente sur les graphiques de la figure III.22 la réponse moyenne en contrainte de différentes phases cristallographiques simulée par les modèles KW et  $\beta$  et obtenue par estimations EF. A première vue, il semble que la règle en  $\beta$  permette d'améliorer globalement la description de l'écoulement EVP des phases par rapport au modèle KW. On note que la composante  $\sigma_{23}$  de la phase  $\varphi^{01}$  pour un essai de traction isochore (voir graphique III.22(a)) est mal décrite par les modèles. On conclut qu'avec les modèles existants, on ne parvient pas à décrire l'écoulement EVP des phases raides pour les alliages hexagonaux avec trois systèmes de glissement. Il est important de noter que ce résultat n'est pas conditionné par la méthode d'identification puisque l'ensemble des modèles éprouvent des difficultés à décrire l'écoulement EVP des phases raides.

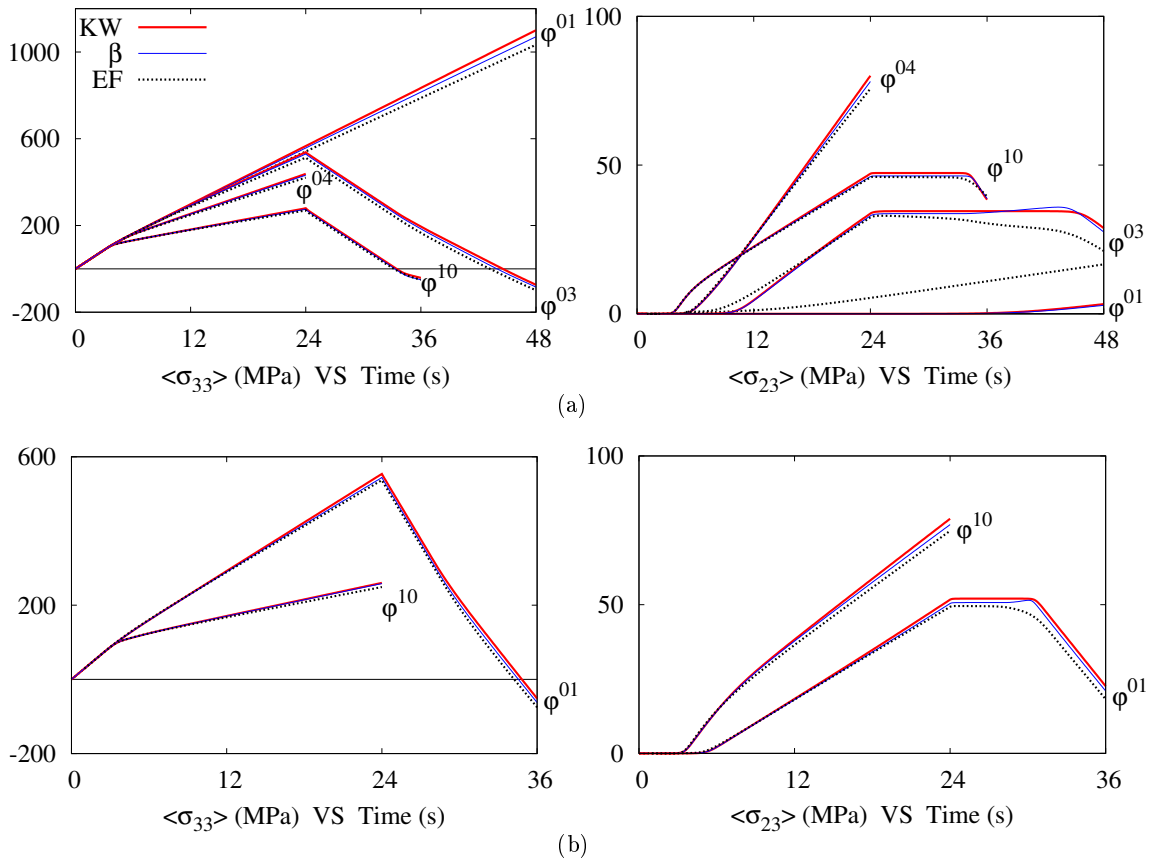


FIG. III.22 – Evolution de deux composantes ( $\sigma_{33}$  et  $\sigma_{23}$ ) du tenseur des contraintes pour différentes phases cristallographiques pour (a) un essai de traction isochore et (b) un essai de cisaillement pur : comparaison des modèle KW et  $\beta$  avec les calculs EF.

Afin de mesurer l'apport du modèle en  $\beta$  par rapport aux modèles KW et BZ, on trace la valeur des six fonctions coûts en fonction de l'angle  $\Phi$ . Comme certains essais de la base ont une sollicitation cyclique, les hypothèses du modèle BZ ne s'appliquent plus et on ne représente les résultats du modèle BZ que pour les essais monotones. Comme on peut le constater sur la figure III.23, la règle en  $\beta$  améliore nettement la description de la réponse mécanique des phases par rapport aux deux modèles puisque l'ensemble des essais présente un écart "modèle/expérience EF" plus faible par rapport à ces modèles. On retrouve de manière plus systématique le fait que la réponse des phases raides est moins bien décrite que la réponse des phases souples. On attribue les difficultés rencontrés par le modèle à l'absence de mécanisme permettant d'accommoder les incompatibilités de déformation suivant l'axe  $c$ . De fait, l'écoulement viscoplastique des phases raides ne peut venir d'une caractéristique propre à la phase. Nous pensons que c'est la plasticité de milieu environnant qui doit permettre de surcontraindre ces phases et d'apporter un niveau de contrainte suffisant pour provoquer l'écoulement viscoplastique des phases raides. L'objectif des évolutions du modèle en  $\beta$  que nous allons proposer par la suite est de mieux décrire l'écoulement EVP des phases cristallographiques et plus particulièrement celui des phases raides.

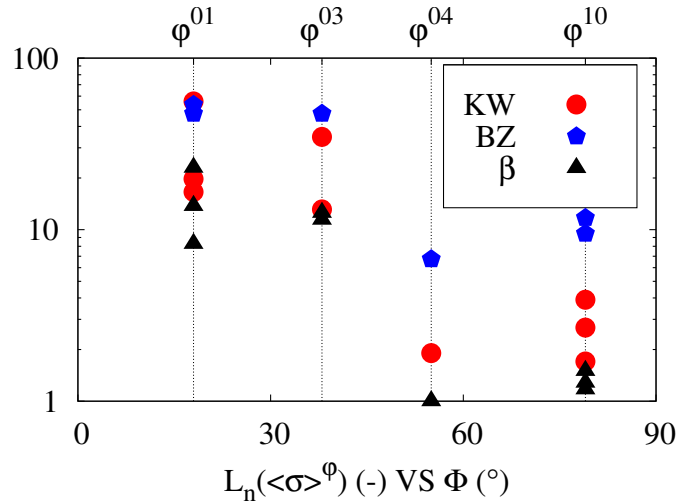


FIG. III.23 – Mise évidence de l'apport de la règle en  $\beta$  par rapport aux modèles KW et BZ.

#### III.4.5 Une transition d'échelle anisotrope et diffuse ?

Nous présentons dans cette partie différentes évolutions de la règle en  $\beta$  dans le but de parvenir à une meilleure description des résultats obtenus par EF. Dans cette règle, initialement proposée par Cailletaud et Pilvin, l'évolution de la variable d'accommodation intergranulaire  $\beta_{= \varphi}$  est donnée par l'équation III.26.

$$\dot{\beta}_{= \varphi} = \dot{\varepsilon}_{= \varphi}^p - D(\beta_{= \varphi} - \delta_{= \varphi}^p) \|\dot{\varepsilon}_{= \varphi}^p\| \quad (\text{III.26})$$

où  $D$  et  $\delta$  sont les paramètres ajustables estimés précédemment par recalage sur les calculs EF.

#### III.4.5.1 Anisotropie hexagonale

Saï propose dans [Sai 06] d'introduire un tenseur  $\mathbb{D}$  dans la règle en  $\beta$  afin de décrire le comportement d'alliages à solidification dirigée. Par analogie à cette étude, nous proposons d'introduire ce terme afin de décrire la symétrie hexagonale des alliages de zirconium. Le tenseur  $\mathbb{D}_\varphi$  modifie l'évolution de la variable d'accommodation et rend la loi de changement d'échelle directionnelle, c'est-à-dire anisotrope. La règle en  $\beta$  s'écrit alors :

$$\dot{\beta}_{\equiv\varphi} = \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{\varphi}^p - \mathbb{D}_\varphi(\beta_{\equiv\varphi} - \delta \underline{\underline{\varepsilon}}_{\varphi}^p) \|\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{\varphi}^p\| \quad (\text{III.27})$$

Dans le repère cristallographique  $\mathcal{R}^\varphi = (\underline{a}_1^\varphi, \underline{a}_2^\varphi, \underline{c}^\varphi)$  de la phase  $\varphi$ , le tenseur  $\mathbb{D}_\varphi$  a la forme suivante :

$$\mathbb{D}_\varphi = \mathbb{J}\mathbb{D} \quad \text{avec} \quad \mathbb{D} = \frac{D}{3} \left( \begin{array}{ccc|ccc} 2 & -1 & -Z_\beta & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -Z_\beta & 0 & 0 & 0 \\ -Z_\beta & -Z_\beta & 2Z_\beta & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 3G_\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3G_\beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 \end{array} \right)_{\mathcal{R}^\varphi} \quad (\text{III.28})$$

où  $Z_\beta$  et  $G_\beta$  sont deux nouveaux paramètres ajustables permettant de décrire l'anisotropie de localisation des champs mécaniques et  $\mathbb{J}$  est le projecteur sur l'espace des contraintes déviatoriques.

On remarque que si  $Z_\beta = G_\beta = 1$ , on retrouve une règle de localisation isotrope puisque  $\forall \varphi \in G$ ,  $\mathbb{D}_\varphi = D\mathbb{J}$ .

#### III.4.5.2 Localisation diffuse

Afin de pallier la difficulté des règles de changement d'échelle à décrire l'écoulement EVP de phases "raides", nous proposons d'introduire un terme de localisation diffus dans la loi d'évolution de la variable d'accommodation de la règle en  $\beta$  selon l'expression III.29. On qualifie le terme supplémentaire de diffus car il ne dépend pas uniquement des caractéristiques propres à la phase, mais aussi des caractéristiques du milieu environnant (le MHE).

$$\dot{\beta}_{\equiv\varphi} = \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{\varphi}^p - \mathbb{D}_\varphi \left[ (\beta_{\equiv\varphi} - \delta \underline{\underline{\varepsilon}}_{\varphi}^p) \|\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{\varphi}^p\| + \Omega \beta_{\equiv\varphi} \|\dot{\underline{\underline{E}}}_{\varphi}^p\| \right] \quad (\text{III.29})$$

où  $\Omega$  est un nouveau paramètre ajustable.

Afin de comprendre comment le terme de localisation diffus agit sur le comportement des phases cristallographiques dans un polycristal, nous étudions dans cette partie le cas d'un polycristal biphasé constitué de deux phases cristallographiques distinctes fortement contrastées : on note ces phases  $\varphi^1$  et  $\varphi^2$ . Afin de mesurer l'impact du terme diffus, on suppose que pour chaque phase  $\varphi$ , la contrainte moyenne  $\underline{\underline{\sigma}}_\varphi$  s'obtient à partir de la règle de localisation III.30.

$$\begin{cases} \underline{\underline{\sigma}}_\varphi = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu(1 - \beta_E) \left( \underline{\underline{B}} - \underline{\underline{\beta}}_\varphi \right) \\ \dot{\underline{\underline{\beta}}}_\varphi = \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_\varphi^{\text{vp}} + \Omega \underline{\underline{\beta}}_\varphi \dot{P} \end{cases} \quad (\text{III.30})$$

avec  $\dot{P}_\varphi$  la vitesse de déformation plastique cumulée de la phase  $\varphi$  et  $\dot{P}$  la vitesse de déformation plastique cumulée du MHE.

Si l'on note  $c_1$  et  $c_2$  les fractions volumiques associées aux phases 1 et 2, le tenseur  $\underline{\underline{B}}$  s'écrit :

$$\underline{\underline{B}} = c_1 \underline{\underline{\beta}}_{\varphi^1} + c_2 \underline{\underline{\beta}}_{\varphi^2} \quad (\text{III.31})$$

Si l'on considère que la phase  $\varphi^2$  a un comportement très raide ( $\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{\varphi^2}^{\text{vp}} = \dot{P}_{\varphi^2} = 0$ ), la déformation plastique cumulée du MHE s'écrit :

$$\dot{P} = c_1 \dot{P}_{\varphi^1} \quad (\text{III.32})$$

En combinant III.30 et III.31 et en dérivant par rapport au temps, les lois d'évolution des contraintes dans les phases  $\varphi^1$  et  $\varphi^2$  sont données par :

$$\begin{cases} \dot{\underline{\underline{\sigma}}}_{\varphi^1} = \dot{\underline{\underline{\Sigma}}} + 2\mu(1 - \beta_E)c_1 \left( \dot{\underline{\underline{\beta}}}_{\varphi^2} - \dot{\underline{\underline{\beta}}}_{\varphi^1} \right) \\ \dot{\underline{\underline{\sigma}}}_{\varphi^2} = \dot{\underline{\underline{\Sigma}}} + 2\mu(1 - \beta_E)c_2 \left( \dot{\underline{\underline{\beta}}}_{\varphi^1} - \dot{\underline{\underline{\beta}}}_{\varphi^2} \right) \end{cases} \quad (\text{III.33})$$

En utilisant la loi d'évolution de  $\underline{\underline{\beta}}_\varphi$  III.30 et l'hypothèse du comportement sur la phase  $\varphi^2$ , on trouve en 1D :

$$\Delta \dot{\underline{\underline{\beta}}} = \dot{\underline{\underline{\beta}}}_{\varphi^1} - \dot{\underline{\underline{\beta}}}_{\varphi^2} = \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{\varphi^1}^{\text{vp}} + \Omega c_1 \dot{P}_{\varphi^1} \Delta \underline{\underline{\beta}} \quad (\text{III.34})$$

En choisissant  $\Omega > 0$ , on a nécessairement  $\Delta \dot{\underline{\underline{\beta}}}(\Omega) > \Delta \dot{\underline{\underline{\beta}}}(\Omega = 0)$ . Le terme de localisation diffus a donc pour effet de surcontraindre la phase raide. On résout ce problème numériquement en choisissant  $\varphi^1 = \varphi^{10}(\Phi = 79^\circ)$  et  $\varphi^2 = \varphi^{01}(\Phi = 18^\circ)$ . On représente sur le graphique de la figure III.24 pour un essai de traction isochore, l'évolution de la contrainte suivant l'axe de traction et d'une composante de cisaillement dans les deux phases en fonction de la déformation macroscopique en prenant  $\Omega = 0$  et  $\Omega = 100$ . On observe que le terme de localisation diffus permet de surcontraindre la



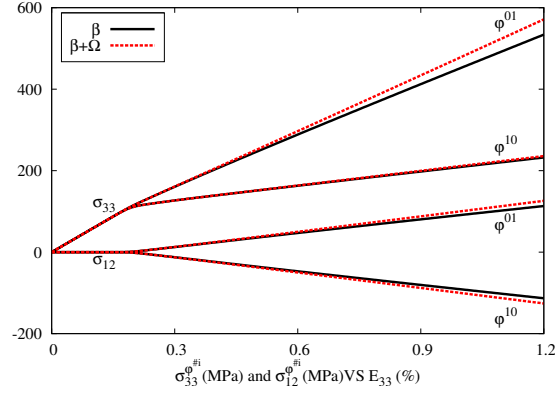
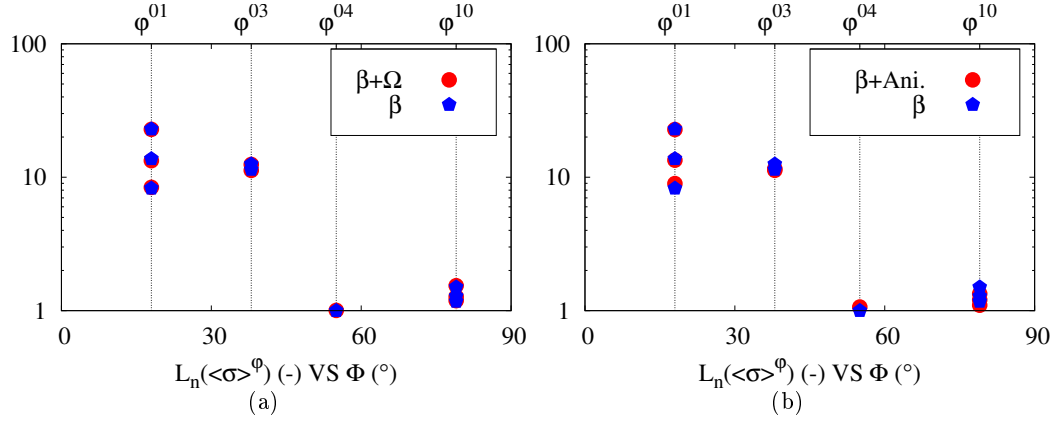


FIG. III.24 – Impact du terme de localisation diffus sur le comportement des phases dans un polycristal biphasé pour un essai de traction isochore et deux composantes du tenseur des contraintes.

phase  $\varphi^{01}$  dans la direction de traction alors qu'il a peu d'effet sur la phase  $\varphi^{10}$ . On note cependant que l'effet du terme diffus est de même intensité sur la composante de cisaillement dans les deux phases. Dans un polycristal multiphasé, ce terme additionnel devrait donc aider les phases mal orientées par rapport à la sollicitation à activer la plasticité grâce à la plasticité du milieu environnant.

#### III.4.5.3 Apport des modifications de la règle en $\beta$

On souhaite estimer l'apport des deux évolutions de la règle en  $\beta$  proposées pour la description de l'écoulement EVP des phases. Les trois nouveaux paramètres ajustables introduits ( $Z_\beta$  et  $G_\beta$  pour l'anisotropie et  $\Omega$  pour le terme diffus) sont estimés avec la même procédure d'identification par méthode inverse sur la base des essais numériques de référence. Comme on peut le constater sur les graphiques de la figure III.25, les évolutions proposées n'apportent que très peu d'améliorations à la description de l'écoulement EVP des phases.


 FIG. III.25 – Ecart modèles/expérience EF pour le modèle en  $\beta$  et ses évolutions.

Dans ce chapitre, nous avons montré que nous sommes en mesure de produire, avec les moyens de calculs actuels, une solution de référence du comportement EVP des phases d'un polycristal par le biais de calculs EF d'agrégats. L'estimateur de la réponse moyenne d'une phase que nous proposons suit un schéma itératif dans lequel l'orientation du grain central est figée et la distribution des orientations des autres grains et le maillage de l'agrégat sont modifiés pour chaque réalisation. La construction de cet estimateur est fondée sur la définition d'une phase cristallographique qui regroupe l'ensemble des grains de même orientation cristallographique sans distinction de forme et de voisinage. L'analyse de la convergence indique que l'estimateur converge vers une solution avec une précision inférieure à 5% dès que le nombre de réalisations est supérieur à 100 et que la vitesse de convergence est proche d'une loi en racine carrée, ce qui est compatible avec l'indépendance statistique des réalisations. Enfin, la procédure d'estimation statistique est appliquée à un cas analytique dans l'annexe B où l'on montre que l'estimateur permet de retrouver la solution théorique du problème en élasticité cubique.

Sur cette démarche, nous construisons une base d'essais numériques pour différentes phases cristallographiques qui nous permet de tester la validité des règles de changement d'échelle. En raison des bonnes propriétés de l'estimateur, nous considérons la solution EF comme une solution de référence en EVP pour la loi de comportement cristalline choisie.

Sur la base de ces calculs, nous avons montré que la règle de transition d'échelle BZ prévoit une réponse moyenne trop souple des phases alors que le modèle KW prévoit, au contraire, une réponse trop raide. Dans ce cadre, le recalage de la règle en  $\beta$  sur les résultats fournis par le modèle BZ pose des problèmes de principe et il est préférable d'estimer les paramètres  $D$  et  $\delta$  en les ajustant sur des calculs EF d'agrégats. Dans ce contexte, la règle en  $\beta$  permet de trouver un compromis intéressant entre les modèles KW et BZ pour les chargements monotones et également une meilleure description de

l'écoulement EVP des phases pour des sollicitations non monotones par rapport au modèle KW. On note cependant que le fait de ne considérer que trois systèmes de glissement prismatique impacte fortement la localisation puisqu'on éprouve des difficultés à décrire l'écoulement des phases raides avec les règles de changement d'échelle analysées dans cette étude. Dans le but de mieux décrire les résultats EF, nous proposons des évolutions qui ne conduisent pas à une nette amélioration de la règle en  $\beta$  historique.

Dans ce chapitre, nous avons étudié le comportement interphase au travers de l'analyse des règles de transition d'échelle. Dans le chapitre qui suit, nous souhaitons utiliser les résultats acquis expérimentalement sur le comportement intraphase pour développer une modélisation polycristalline du comportement à 400°C en fluage multiaxé d'un alliage Zy-4 recristallisé.

# Chapitre IV

---

## Modélisations polycristalline et macroscopique du comportement en fluage

---

### IV.1 Introduction

Nous présentons dans ce chapitre les différentes stratégies de modélisation entreprises dans cette étude. On rappelle que la démarche retenue s'appuie sur deux approches synergiques : une approche polycristalline qui prend en compte la texture cristallographique des gaines et une approche macroscopique dédiée à une utilisation courante dans un code de conception des assemblages. L'approche micromécanique est détaillée et les mécanismes introduits dans la modélisation sont présentés en s'appuyant sur l'étude expérimentale réalisée en MET par Rautenberg [Rautenberg 09]. Sous réserve d'une bonne description du comportement, l'approche micromécanique peut être utilisée comme machine d'essais numériques dont les résultats peuvent être exploités dans des modélisations macroscopiques. Nous utiliserons également dans ce chapitre les résultats obtenus lors du chapitre III concernant les règles de changement d'échelle pour les alliages hexagonaux avec trois systèmes de glissement prismatiques.

De très nombreux travaux traitent de la modélisation du comportement mécanique des alliages de zirconium. La plupart des modèles sont construits pour répondre à une problématique industrielle bien précise. Dunlop [Dunlop 05] et Saintoyant [Saintoyant 09] proposent des modèles à partir des travaux de Kocks, Mecking et Estrin et de Cailleaud et Pilvin et appliquent leurs modèles au comportement en fluage/recristallisation d'un alliage de Zy-4 dont l'application concerne principalement le transport du combustible. Dans ces travaux, le comportement en fluage/recristallisation est étudié entre

400°C et 520°C. Onimus [Onimus 03] et Ribis [Ribis 07] développent des approches micromécaniques du comportement d’alliages de zirconium irradiés pour des problématiques de transport et de stockage du combustible. Schäffler [Schäffler 97] propose une modélisation du comportement sous irradiation d’un alliage de zirconium dont l’application concerne le comportement en réacteur. Brenner s’appuie sur une démarche auto-cohérente avec une linéarisation affine du comportement des phases [Brenner 01] pour décrire le comportement en fluage d’alliages de zirconium (alliage Zy-4 recristallisé avec différentes textures cristallographiques). Enfin, Delobelle et Robinet proposent un modèle de comportement élastoviscoplastique [Delobelle 96, Robinet 95] permettant de décrire le comportement de tubes en Zy-4 à l’état recristallisé et détendu. Selon Robinet, *“la connaissance précise des lois de comportement des matériaux entrant dans la fabrication des installations nucléaires s’avère être indispensable pour une éventuelle prévision de la durée de vie de ces structures”*.

Nos travaux s’inscrivent dans la problématique du comportement en fluage thermique des alliages de zirconium qui intervient à différentes étapes de la vie du matériau de gainage.

Dans ce chapitre, nous détaillons dans une première partie la modélisation micromécanique du comportement à 400°C d’un alliage Zy-4 recristallisé qui a été développé dans cette étude. Dans une seconde partie, nous montrons comment tirer profit des résultats fournis par le modèle polycristallin dans le cadre de modèles macroscopiques. Ce transfert de “connaissance” d’un modèle micromécanique vers un modèle EVP macroscopique est appliqué au comportement du Zy-4 recristallisé à 20°C en utilisant les données expérimentales de la thèse de Robinet et également au comportement en fluage à 400°C.

## IV.2 Modélisation polycristalline du comportement à 400°C

Le modèle polycristallin, utilisant la règle de localisation en  $\beta$ , initialement développé pour les alliages CFC par Cailletaud [Cailletaud 87] et Pilvin [Pilvin 90] a été étendu aux alliages de titane et de zirconium dans les travaux de Vogel, Feaugas et Geyer [Vogel 96, Feaugas 97, Geyer 99b, Geyer 99a]. Les développements de cette approche se sont poursuivis par les travaux de Onimus [Onimus 03, Onimus 04, Onimus 06] qui s’est principalement intéressé aux effets de l’irradiation. Une bonne compréhension des mécanismes à l’origine de la canalisation basale observée dans les alliages de zirconium a permis de proposer une modélisation. La stratégie de modélisation utilisée dans ces approches s’appuie sur une démarche qui intègre les mécanismes microscopiques responsables de la déformation plastique, ainsi que sur une description statistique de la distribution des orientations cristallines (FDOC).

Les travaux de Geyer nous ont montré la capacité du modèle polycristallin à décrire le comportement à température ambiante de l’alliage Zy-4 recristallisé. D’après les

données issues de la littérature et également les données expérimentales acquises en relaxation dans cette étude, on sait que les alliages de zirconium sont sensibles aux effets du vieillissement pour des températures comprises entre 200°C et 350°C. Dans notre modélisation, nous faisons l'hypothèse que l'on est sorti de ce domaine de vieillissement et que le comportement à 400°C est peu affecté par ces phénomènes.

### IV.2.1 Loi de comportement à l'échelle des grains

L'objectif de la modélisation polycristalline est de parvenir à une bonne description de l'anisotropie en fluage thermique à 400°C des alliages de zirconium recristallisés grâce à la loi de comportement intragranulaire que nous décrivons dans cette partie, et à la règle de changement d'échelle en  $\beta$  dont le niveau d'approximation a été étudié au chapitre III. Les choix effectués en terme de mécanismes de déformation résultent de l'étude en Microscopie Electronique en Transmission entreprise dans le cadre de la thèse de Rautenberg [Rautenberg 09].

Le comportement mécanique décrit dans cette partie est similaire au modèle de plasticité cristalline du chapitre III relatif aux calculs d'agrégats. La différence réside principalement dans l'introduction d'une règle de changement d'échelle dans le modèle polycristallin alors que dans les calculs EF en champs complets, la transition d'échelle est implicite. La loi de comportement que nous avons choisie pour décrire le comportement du matériau est plus complexe que celle introduite dans les agrégats polycristallins. En effet, le choix de ne retenir que le glissement prismatique dans les calculs d'agrégats a été fait pour exacerber les effets de l'anisotropie du comportement local sur la transition d'échelle. L'idée ici est d'avoir une description des mécanismes fidèle aux observations réalisées en MET. Dans ce modèle, nous considérons l'élasticité isotrope et homogène et nous prenons en compte les systèmes de glissement prismatique  $P\langle a \rangle$  et également les systèmes pyramidaux  $\pi_1\langle a \rangle$ .

A l'échelle d'une phase cristallographique  $\varphi$ , on ne raisonne que sur les valeurs moyennes des champs. On calcule donc la cission résolue  $\tau_\varphi^{(s)}$  sur un système de glissement  $(\underline{n}_s, \underline{l}_s)$  à partir des contraintes moyennes  $\underline{\sigma}_\varphi$  dans la phase  $\varphi$  par projection.

$$\tau_\varphi^{(s)} = \underline{\sigma}_\varphi : \underline{\mu}_\varphi^{(s)} \quad (\text{IV.1})$$

où  $\underline{\mu}_\varphi^{(s)}$  est le tenseur d'orientation du système  $s$  de la phase  $\varphi$  définie par ses angles d'Euler.

Le système de glissement  $s$  est actif lorsque la valeur absolue de sa cission résolue,  $\tau_\varphi^{(s)}$ , est plus grande que la cission critique du système  $s$  considéré. Lorsque la plasticité s'active dans une phase, la densité de dislocations augmente et s'accompagne d'un écrouissage qui se traduit par une augmentation de la cission critique. Cette contribution athermique,  $\tau_\mu^s$ , à la contrainte d'écoulement effective, est reliée à la densité de dislocations sur le système  $s$  (autoécrouissage) mais également à la densité sur les autres

systèmes (écrouissage latent) au travers de la matrice d'interaction entre systèmes de glissement  $A_{rs}$ . Finalement, la cission effective peut s'exprimer *via* la relation IV.2.

$$\tau_{vp}^{(s)} = |\tau_\varphi^{(s)}| - \tau_\mu^s \quad \text{avec} \quad \tau_\mu^s = \tau_0^s + \alpha\mu b \sqrt{\sum_{r \in S} A_{rs} \rho_r} \quad (\text{IV.2})$$

où  $S$  représente l'ensemble des systèmes considérés,  $\rho_r$  la densité de dislocations sur le système  $r$ ,  $\mu$  le module de cisaillement,  $b$  le module du vecteur de Burgers,  $\alpha$  une constante représentant la force des obstacles et  $\tau_0^s$  la cission critique du système  $s$ .

Le franchissement des obstacles à courte distance étant thermiquement activé, le taux de cisaillement d'un système  $s$  peut être exprimé par la relation IV.3.

$$\dot{\gamma}_s^\varphi = \dot{\gamma}_0 \exp\left(\frac{\sigma_H^\varphi V_H}{k_B T}\right) \sinh\left(\frac{[\tau_{vp}^{(s)}]^+ V_s}{k_B T}\right) \frac{\tau_\varphi^{(s)}}{|\tau_\varphi^{(s)}|} \quad (\text{IV.3})$$

avec  $\dot{\gamma}_0$  une constante qui dépend de la température,  $V_s$  le volume d'activation du système  $s$  et  $V_H$  le volume d'activation attaché à la partie hydrostatique  $\sigma_H^\varphi$  de la contrainte dans la phase  $\varphi$ ,  $[f]^+$  la partie positive de  $f$ ,  $k_B$  la constante de Boltzmann et  $T$  la température.

En sommant ces taux de cisaillement sur l'ensemble des systèmes de glissement selon l'expression IV.4, on obtient la vitesse de déformation viscoplastique  $\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_\varphi^{vp}$  moyenne dans la phase  $\varphi$ .

$$\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_\varphi^{vp} = \sum_{s \in S} \dot{\gamma}_s^\varphi \mu_\varphi^{(s)} \quad (\text{IV.4})$$

Pour calculer l'évolution de l'écrouissage, nous avons besoin de connaître les densités de dislocations  $\rho_s$  sur les différents systèmes. Un bilan entre la production des boucles de dislocations par un mécanisme de Frank et Read et leur annihilation permet d'estimer à chaque instant les densités sur les différents systèmes. C'est dans ce bilan que nous avons choisi de faire intervenir le glissement dévié des dislocations. Le mécanisme de glissement dévié est schématisé sur les figures IV.1. Il peut conduire à une production de dislocations sur les plans pyramidaux par déviation stable des dislocations prismatiques, mais également à une annihilation à plus longue distance des dislocations prismatiques (par un mécanisme de double glissement dévié). En tenant compte, dans la loi d'évolution des densités de dislocations, de la probabilité de glissement dévié  $P_{CS}^{(s)}$ , on peut écrire pour la densité de dislocations d'un système primatique :

$$\text{Si } s \in P^{<a>} \quad \dot{\rho}_s = \frac{|\dot{\gamma}_s|}{b} \left[ \frac{1}{\lambda_P} - 2y_s \left( 1 + y_{CS} P_{CS}^{(s)} \right) \rho_s \right] - B(T)(\rho_s - \rho_0) \quad (\text{IV.5})$$

où  $\lambda_P$  est le libre parcours moyen des dislocations sur les plans prismatiques,  $k_{CS}$  le terme de production de dislocations sur les plans  $\pi_1 \langle a \rangle$  par glissement dévié,  $y_P$  la distance critique d'annihilation sur les plans prismatiques et  $y_{CS}$  le paramètre permettant de gérer l'augmentation de la distance critique d'annihilation entre deux dislocations sous l'effet du glissement dévié.

Nous estimons la probabilité de glissement dévié d'un système prismatique  $s$  à partir du maximum des cisssions sur les deux plans pyramidaux en correspondance avec  $s$  (ensemble que l'on note  $\pi_1^{(s)}$ ) comme proposé dans [Groh 09] selon l'expression IV.6.

$$P_{CS}^{(s)} = \beta_0 \exp \left[ \frac{\left( \max_{s \in \pi_1^{(s)}} |\tau_{\pi_1 \langle a \rangle}| - \tau_{\pi_1 \langle a \rangle}^\mu \right) V_{CS}}{k_B T} \right] \quad (\text{IV.6})$$

où  $V_{CS}$  est le volume d'activation associé au mécanisme de glissement dévié.

Nous souhaitons appliquer ce modèle au comportement en fluage à 400°C et nous faisons l'hypothèse que le terme de restauration de la densité de dislocations est inactif pour cette température ( $B = 0$ ). Concernant l'évolution de la densité de dislocations sur les plans pyramidaux, le glissement dévié ajoute un terme de production selon l'expression IV.7.

$$\text{Si } q \in \pi_1 \langle a \rangle \quad \dot{\rho}_q = \frac{|\dot{\gamma}_q|}{b} \left[ \frac{1}{\lambda_\pi} + k_{CS} P_{CS}^{Pq} \rho_{Pq} - 2y_\pi \rho_q \right] \quad (\text{IV.7})$$

avec  $\lambda_\pi$  le libre parcours moyen des dislocations sur les plans pyramidaux,  $P^q$  le système prismatique en correspondance avec le système  $q$  (vis-à-vis de la déviation) et  $y_\pi$  la distance critique d'annihilation sur les plans pyramidaux.

Ainsi, *via* le terme de probabilité, le mécanisme de glissement dévié favorise l'annihilation des dislocations prismatiques (voir Eq.IV.5 et Fig.IV.1(c)) et la production de dislocations pyramidales (voir Eq.IV.7 et Fig.IV.1(b)).

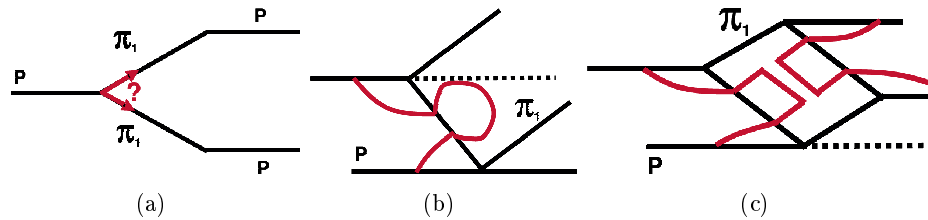


FIG. IV.1 – Description schématique du mécanisme de glissement dévié. (a) Déviation d'une dislocation prismatique sur un des deux plans pyramidaux en correspondance (continuité du vecteur de Burgers), (b) production de dislocations sur les plans  $\pi_1 \langle a \rangle$  et (c) annihilation à longue distance des dislocations  $P \langle a \rangle$ .



| Variable interne (VI)                            | Symbole  | Nombre de VI  | Ordre de grandeur                                   |
|--|--|---------------|---|
| Densité de dislocations                          | $\rho$   | $9*N_\varphi$ | $\rho < 10^{+15} \text{m/m}^3$                      |
| Partie plastique de la déformation moyenne       | $\underline{\underline{\varepsilon}}_\varphi^{vp}$ | $6*N_\varphi$ | $ \varepsilon_\varphi^{vp}  < \text{quelques } \%$  |
| Variable d'accommodation des phases              | $\underline{\underline{\beta}}_\varphi$            | $6*N_\varphi$ | $ \beta_\varphi  \simeq  \varepsilon_\varphi^{vp} $ |
| Partie plastique de la déformation macroscopique | $\underline{\underline{E}}^{vp}$                   | 6             | $ E_\varphi^{vp}  < \text{quelques } \%$            |
| Déformation plastique cumulée                    | $p$  | 1             |   |

TAB. IV.1 – Variables internes du modèle polycristallin.

Le modèle polycristallin développé dans cette étude possède de nombreuses variables internes. Les équations de ce modèle ont été programmées dans le logiciel SiDoLo qui prend en charge l'intégration numérique des équations différentielles du modèle mais également l'identification des coefficients matériau du modèle. Dans le tableau IV.1, nous détaillons le nombre de variables manipulées (pour un polycristal constitué de  $N_\varphi$  phases cristallographiques) dans le modèle ainsi qu'un ordre de grandeur de ces variables. L'évolution de ces variables est pilotée par un nombre de coefficients matériau relativement restreint (environ quinze).

| Coefficient        | Unité           | Descriptif                             | Ordre de grandeur |
|--------------------|-----------------|--|-------------------|
| $y_s$              | nm              | Rayon de capture d'une dislocation     | $< 30$            |
| $\lambda_s$        | $\mu\text{m}$   | Libre parcours moyen d'une dislocation | $< 5$             |
| $\rho_0$           | $\text{m/m}^3$  | Densité de dislocations initiale       | $\simeq 10^{+10}$ |
| $\alpha_s$         | -               | Force d'obstacle                       | $\simeq 0,2$      |
| $\dot{\gamma}_0^s$ | $\text{s}^{-1}$ | Terme préexponentiel                   | $< 10^{-10}$      |
| $\tau_0^s$         | MPa             | Cission critique                       | $\simeq 0$        |
| $V^s$              | $\text{b}^3$    | Volume d'activation                    | $\leq 200$        |

TAB. IV.2 – Descriptif et ordre de grandeur des coefficients du modèle à 400°C pour un alliage de zirconium recristallisé.

### IV.2.2 Transition d'échelle VER $\longrightarrow$ phases cristallographiques

Pour assurer la transition d'échelle dans la modélisation polycristalline, nous considérons un Volume Élémentaire Représentatif (VER) de notre matériau contenant suffisamment de grains pour être représentatif du comportement macro-homogène et de la texture cristallographique du polycristal. La texture employée pour simuler le comportement d'un polycristal de Zy-4 recristallisé contient les 1113 orientations du tube de gaine en Zy-4 recristallisé de la thèse de Geyer [Geyer 99a]. A la lumière des résultats

obtenus lors du chapitre III, nous utilisons la règle de localisation en  $\beta$  pour estimer les contraintes moyennes dans les phases à partir de la sollicitation macroscopique selon les expressions IV.8 et IV.9.

$$\underline{\underline{\sigma}}_{\varphi} = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu(1 - \beta_E) \left( \underline{\underline{B}} - \underline{\underline{\beta}}_{\varphi} \right) \quad (\text{IV.8})$$

$$\text{avec} \quad \begin{cases} \underline{\underline{B}} &= \sum_{\varphi \in G} f_{\varphi} \underline{\underline{\beta}}_{\varphi} \\ \dot{\underline{\underline{\beta}}}_{\varphi} &= \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^p - \mathbb{D}_{\varphi}(\underline{\underline{\beta}}_{\varphi} - \delta \underline{\underline{\varepsilon}}_{\varphi}^p) \dot{p}_{\varphi} - M \left\| \underline{\underline{\beta}}_{\varphi} \right\|^m \underline{\underline{\beta}}_{\varphi} \end{cases} \quad (\text{IV.9})$$

Dans ces expressions,  $G$  est l'ensemble des phases cristallines décrit par la FDOC.

Comme proposé dans [Forest 95], on ajoute un terme de restauration dans cette règle de localisation. L'objectif de ce terme additionnel est de décrire les phénomènes de relaxation de la contrainte interne observés à 350°C par Geyer lors d'essais de relaxation sur un alliage de Zy-4 recristallisé. Les calculs d'agrégats réalisés dans le chapitre III ne mettent pas en avant l'importance de ce phénomène à cause de la durée trop faible des essais numériques. Pour mettre en évidence ce terme de restauration par l'intermédiaire de calculs EF d'agrégats, il faudrait mener des essais de traction lente ( $\dot{\varepsilon} \simeq 10^{-7} \text{s}^{-1}$ ) ou des essais d'écrouissage-relaxation, qui conduiraient à des durées de calcul trop importantes. Comme nous allons le voir dans la partie suivante, ce terme additionnel est nécessaire pour aboutir à une bonne description du comportement en fluage et en relaxation.

### IV.2.3 Identification du modèle polycristallin à 400°C

La base de données expérimentales à 400°C contient l'ensemble des essais de fluage multiaxial ainsi que les deux essais de relaxation. Les données exploitées dans cette partie sont celles présentées dans le chapitre II de ce manuscrit. L'ensemble des résultats expérimentaux sont pondérés de la même manière dans le processus d'identification à l'exception de l'essai d'écrouissage/relaxation sur lequel nous imposons un poids plus important afin de contraindre le modèle à bien décrire le comportement en écrouissage.

#### IV.2.3.1 Modèle polycristallin avec la règle de Kröner

A la vue des résultats obtenus dans le chapitre III, il semble que la règle Kröner (KW) soit en mesure de décrire avec une précision correcte l'écoulement EVP des phases cristallographiques d'un polycristal (tout du moins celles dont le comportement n'est pas trop raide). Toutefois, on a montré que, dans la plupart des cas, ce modèle prédisait un niveau de contrainte trop élevé par rapport à l'estimation de référence obtenue en EF et donc un comportement macroscopique trop raide. Nous supposons, dans un premier temps, que seul le glissement prismatique est actif et qu'il n'y a pas de restauration des contraintes internes ( $M = 0$ ). L'identification du modèle polycristallin, sous ces hypothèses, conduit à une mauvaise description des réponses mesurées tant en fluage (Fig.

IV.2(b)) qu'en relaxation (Fig. IV.2(a)). On peut observer sur les figures IV.2 que le modèle avec la règle KW ne parvient pas à décrire la non linéarité du comportement mesurée par les essais de relaxation multiple. Afin de montrer que les problèmes viennent en partie de la règle de localisation, on tente une nouvelle identification de ce modèle en ajoutant les systèmes de glissement pyramidaux. Comme on peut le constater sur la figure IV.2(a), le modèle ne parvient toujours pas à décrire les réponses expérimentales. On observe que l'ajout d'une famille de systèmes dans le modèle conduit à une augmentation du taux de relaxation de la contrainte. L'objectif du modèle étant de décrire le comportement en fluage, il nous semble nécessaire de bien décrire le comportement en écrouissage afin d'estimer correctement les niveaux de contrainte pour les essais de fluage. Nous concluons finalement que l'utilisation de la règle de Kröner pour estimer la contrainte moyenne dans les phases conduit à un comportement macroscopique trop éloigné de la réalité expérimentale [Zaoui 72].

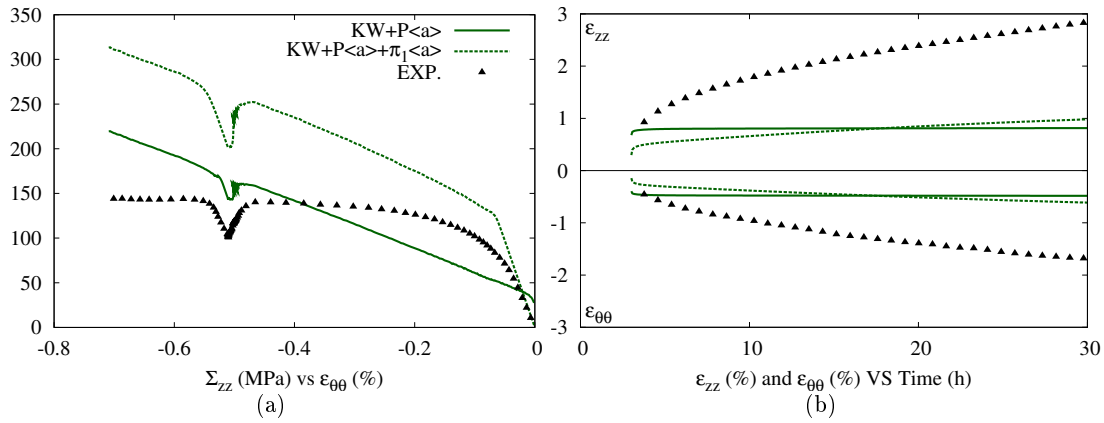


FIG. IV.2 – Comparaison des résultats obtenus en relaxation et en flua axial avec la règle de Kröner.

### IV.2.3.2 Modèle polycristallin avec la règle en $\beta$

Comme indiqué dans la section IV.2.1, nous supposons que seuls les glissements prismatiques ( $P<a>$ ) et pyramidaux ( $\pi_1<a>$ ) sont actifs. Nous ne considérons pas, dans un premier temps, le mécanisme de glissement dévié des dislocations. Enfin, nous modélisons la restauration des contraintes internes *via* l'introduction du terme additif dans la règle de localisation (voir Eq. IV.9) avec un exposant  $m$  fixé à 7 en référence aux travaux de Robinet [Robinet 95]. De plus, par manque de temps, nous supposons que  $\mathbb{D}_\varphi = D\mathbb{J}$ , c'est-à-dire,  $G_\beta = Z_\beta = 1$  dans l'équation III.28, car la justification des valeurs de ces coefficients nécessiterait de poursuivre les calculs d'agrégats avec une texture anisotrope.

### Identification des paramètres du modèle

Sous ces hypothèses, l'identification du modèle conduit aux valeurs des coefficients détaillés dans le tableau IV.3. Nous pouvons souligner ici l'intérêt d'une modélisation plus physique du comportement mécanique car il est alors possible de borner leurs valeurs lors du processus d'identification.

On sait, par exemple, que le libre parcours moyen  $\lambda$  des dislocations ne peut pas excéder la taille de grain. Nous trouvons ici  $\lambda_P = 5\mu\text{m}$  et  $\lambda_\pi = 4,2\mu\text{m}$  à comparer à la taille moyenne de grain de  $5\mu\text{m}$  (voir section II.2). Ce résultat nous indique que ce sont les joints de grains qui pilotent le libre parcours moyen des dislocations et que les précipités semblent avoir peu d'effet sur cette grandeur.

Nous pouvons également comparer la valeur du volume d'activation hydrostatique obtenue ( $V_H = 1,6b^3$ ) à celle obtenue par Frénois [Frénois 01] pour un alliage de tantale à 300K ( $V_H = 4,2b^3$ ). Ce volume d'activation traduit une faible sensibilité de l'écoulement à la contrainte hydrostatique ainsi qu'une asymétrie de comportement traction/compression. On peut interpréter cette sensibilité à l'échelle des dislocations par un étalement de cœur des dislocations vis sur une distance de quelques distances interatomiques. Selon Ferrer [Ferrer 00], cet étalement est à l'origine d'une force Peierls élevée et peut expliquer d'éventuels écarts à la loi de Schmid.

Il semble que le rayon de capture des dislocations prismatiques soit élevé ( $y_P = 161b$ ) mais l'introduction du mécanisme de glissement dévié devrait permettre de diminuer la valeur de ce coefficient. Le volume d'activation du glissement prismatique est identifié à  $198b^3$ . Cette valeur est proche de celle trouvée en relaxation (voir chapitre II) en supposant un facteur de Taylor voisin de 4. Pour comparaison, Geyer obtient  $V^P = 19b^3$  et  $V^\pi = 17b^3$  à 20°C.

De plus, nous pouvons noter que les cissions critiques des deux systèmes sont très faibles. Par conséquent, c'est principalement la viscosité des mécanismes, *via* leur volume d'activation, qui permet de contrôler l'activation du glissement.

Enfin, on note une très forte différence entre les termes préexponentiels des glissements prismatiques et pyramidaux ( $\dot{\gamma}_0^\pi/\dot{\gamma}_0^P > 10^5$ ). Si on fait l'hypothèse que les glissements cristallins sont pilotés par un mécanisme de double décrochement, on peut relier ce terme aux longueurs caractéristiques de ce mécanisme : la largeur critique du double décrochement  $w$  et la longueur libre de dislocations  $\bar{L}$ . Le terme  $\dot{\gamma}_0$  est alors donné par la relation IV.10 [Dorn 64].

$$\dot{\gamma}_0^s = \rho_m^s b^3 \nu_D \frac{\bar{L}^s}{w_s^2} \quad (\text{IV.10})$$

où  $\rho_m^s$  est la densité de dislocations mobiles sur  $s$  et  $\nu_D$  la fréquence de Debye.

Les différences entre les longueurs caractéristiques et les densités de dislocations ne peuvent pas expliquer de telles différences sur les termes préexponentiels. C'est donc que

| Coefficients         | Unité           | Descriptif                         | Valeur                |
|----------------------|-----------------|------------------------------------|-----------------------|
| $E$                  | GPa             | Module de Young                    | 79                    |
| $\nu$                | -               | Coefficient de Poisson             | 0,35                  |
| $D$                  | -               | Coefficient de la règle en $\beta$ | 398                   |
| $\delta$             | -               | Coefficient de la règle en $\beta$ | 0,1                   |
| $M$                  | s <sup>-1</sup> | Coefficient de restauration        | 33                    |
| $m$                  | -               | Exposant de restauration           | 7                     |
| $\rho_0$             | m <sup>-2</sup> | Densité de dislocations initiale   | 6,7.10 <sup>+10</sup> |
| $\alpha_P$           | -               | Force d'obstacle                   | 0,199                 |
| $\alpha_\pi$         | -               | Force d'obstacle                   | 0,025                 |
| $y_P$                | $b$             | Rayon de capture d'une dislocation | 161                   |
| $y_\pi$              | $b$             | Rayon de capture d'une dislocation | 10                    |
| $\lambda_P$          | $\mu\text{m}$   | Libre parcours moyen               | 5                     |
| $\lambda_\pi$        | $\mu\text{m}$   | Libre parcours moyen               | 4,3                   |
| $\dot{\gamma}_0^P$   | s <sup>-1</sup> | Terme préexponentiel               | 5.10 <sup>-16</sup>   |
| $\dot{\gamma}_0^\pi$ | s <sup>-1</sup> | Terme préexponentiel               | 7.10 <sup>-11</sup>   |
| $\tau_0^P$           | MPa             | Cission critique                   | 1,0                   |
| $\tau_0^\pi$         | MPa             | Cission critique                   | 1,2                   |
| $V^P$                | b <sup>3</sup>  | Volume d'activation                | 198                   |
| $V^\pi$              | b <sup>3</sup>  | Volume d'activation                | 53                    |
| $V_H$                | b <sup>3</sup>  | Volume d'activation hydrostatique  | 1,6                   |

TAB. IV.3 – Valeur des coefficients du modèle polycristallin identifié pour décrire le comportement du Zy-4 recristallisé en fluage à 400°C.

les mécanismes de déformation ne sont pas les mêmes sur les plans pyramidaux et sur les plans prismatiques. On peut penser que le modèle de double décrochement permet d'expliquer les mécanismes prismatiques. En revanche, on peut penser qu'un mécanisme de type production de boucles serait plus adapté pour les systèmes pyramidaux.

#### IV.2.4 Comparaison essais-modèle

Les résultats du modèle sont présentés sur les figures IV.3, IV.4 et IV.5 sous la forme de courbes déformations/temps pour les essais de fluage et contrainte/temps et contrainte/déformation pour l'essai de relaxation. On observe globalement une bonne description du comportement en fluage et de son anisotropie. Le comportement trop raide du modèle en écrouissage peut expliquer une partie des difficultés rencontrées pour décrire certains essais de fluage fortement chargés.

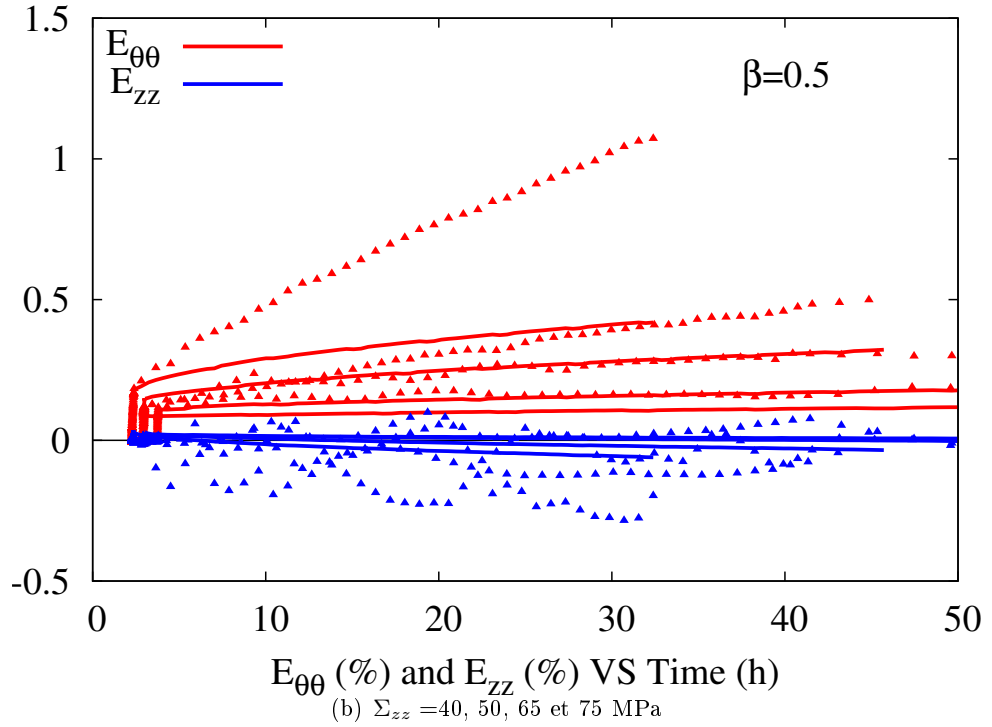
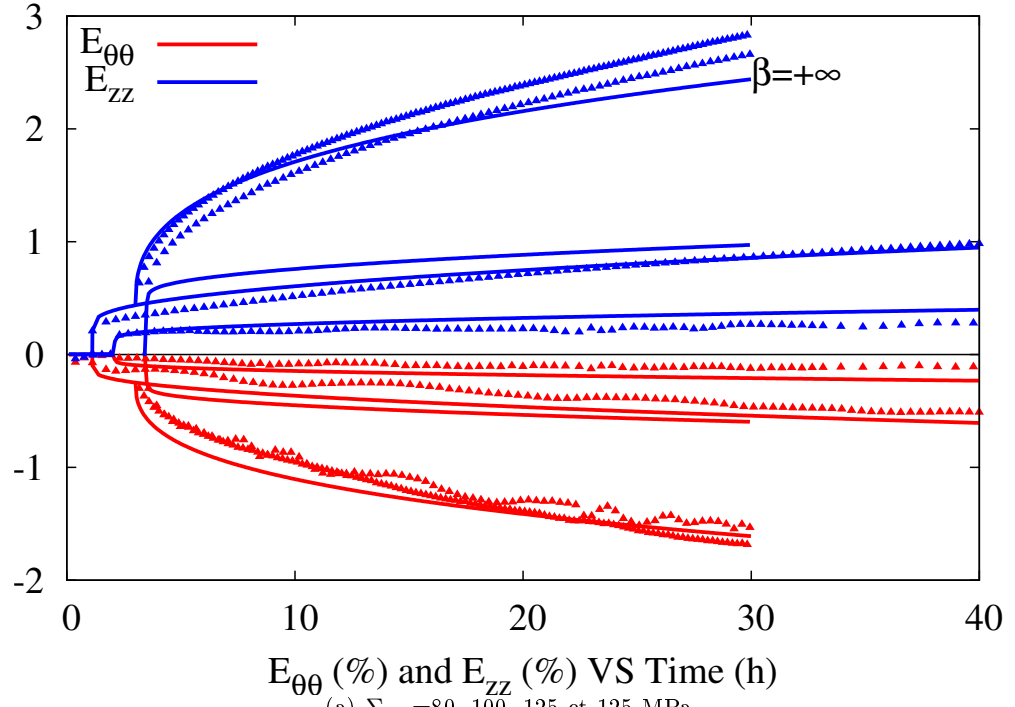


FIG. IV.3 – Confrontation de la simulation avec le modèle polycristallin (ligne) des essais de fluage [(a)  $\beta = +\infty$  et (b)  $\beta = 0, 5$ ] à 400°C sur un alliage Zy-4 recristallisé avec les données expérimentales (triangle).

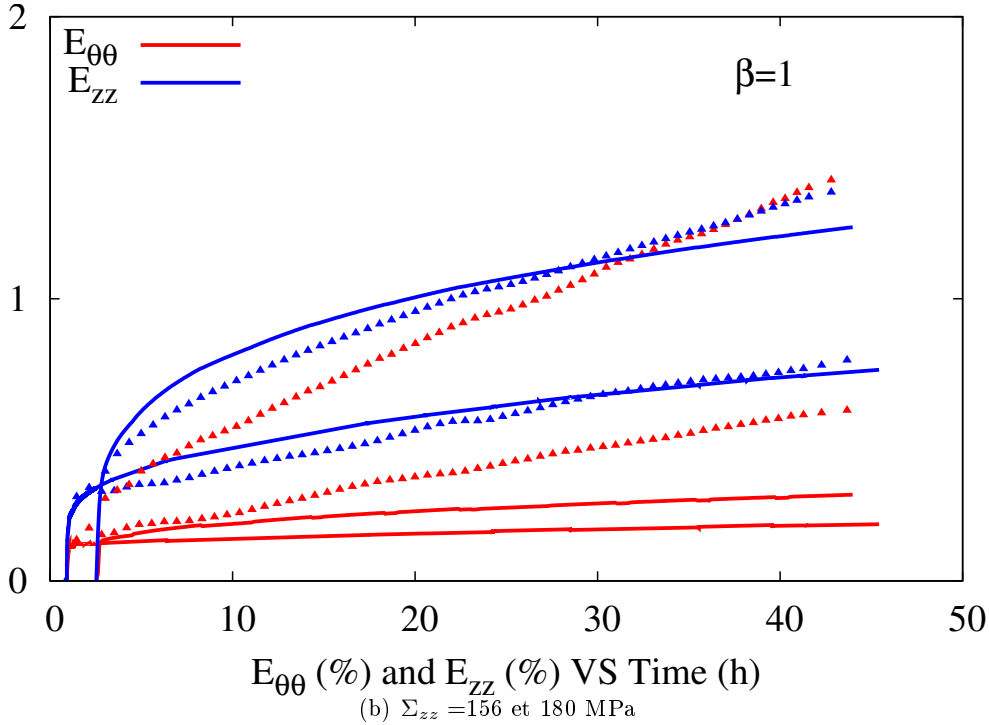
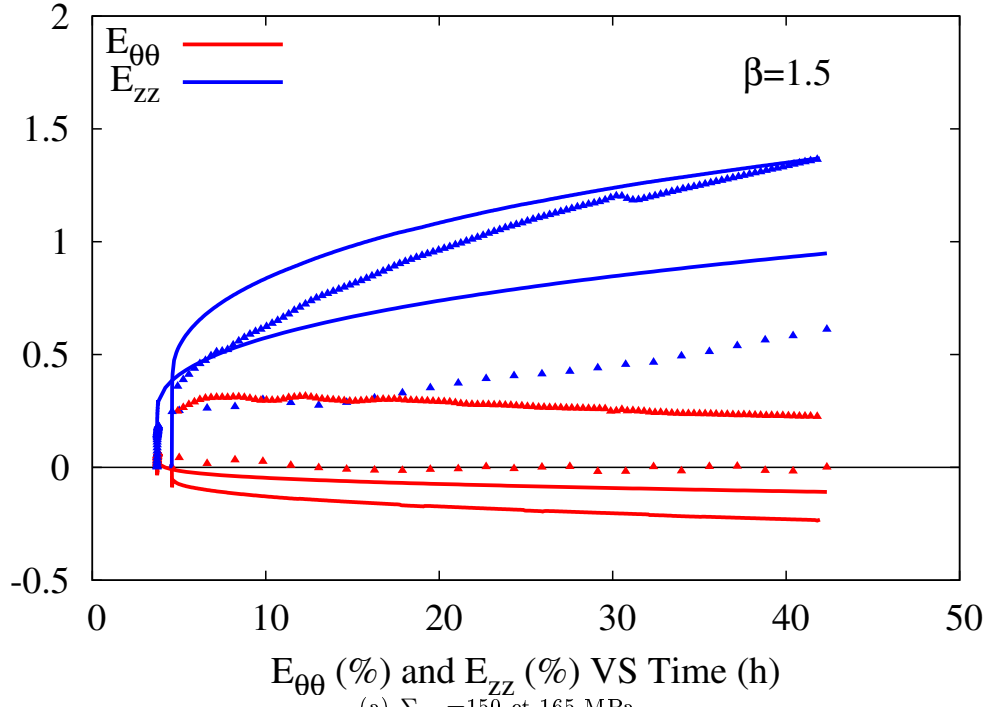


FIG. IV.4 – Confrontation de la simulation avec le modèle polycristallin (ligne) des essais de fluage [(a)  $\beta = 1,5$  et (b)  $\beta = 2,5$ ] à  $400^\circ\text{C}$  sur un alliage Zy-4 recristallisé avec les données expérimentales (triangle).

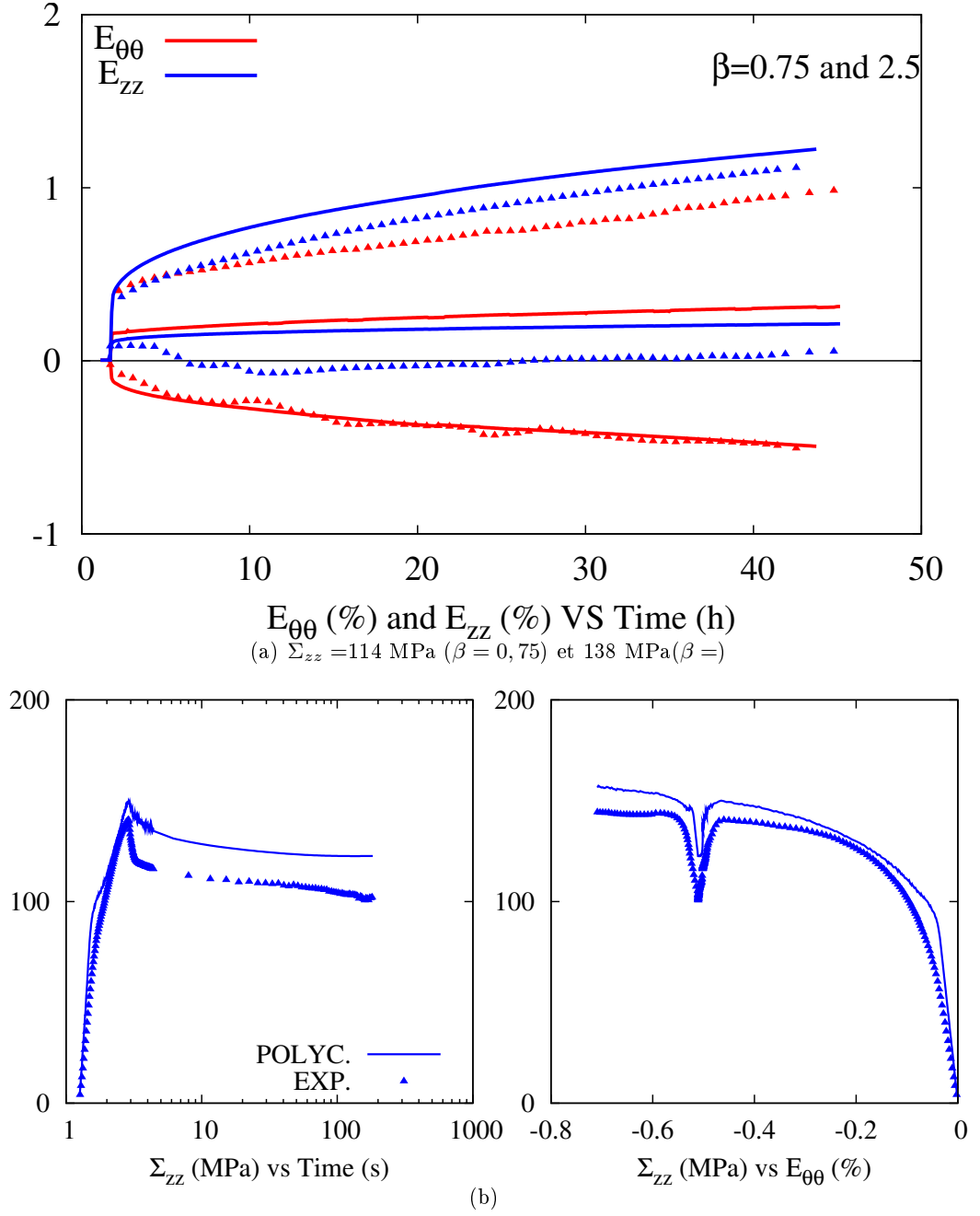


FIG. IV.5 – Confrontation de la simulation avec le modèle polycristallin (ligne) des essais de (a) fluage [ $\beta = 0,75$  et  $\beta = 2,5$ ] et (b) de relaxation à 400°C sur un alliage Zy-4 recristallisé avec les données expérimentales (triangle).



## IV.2.5 Surfaces isovitesse

### IV.2.5.1 Estimation dichotomique des surfaces isovitesse

Dans le but de simuler les surfaces isovitesse avec le modèle polycristallin, nous proposons une estimation dichotomique des points de ces surfaces. On calcule les surfaces dans le plan  $(\Sigma_{\theta\theta}, \Sigma_{zz})$  et pour chaque trajet de chargement  $\beta$ , on simule un essai de fluage d'une durée de 24 heures pour un niveau de contrainte bas et un niveau haut. On obtient alors des vitesses de fluage équivalente correspondant aux niveaux de contrainte bas et haut, si la vitesse cible  $\dot{\epsilon}_{cible}^{II}$  est compris dans cet intervalle, on peut commencer la recherche dichotomique, sinon on réajuste les niveaux de contrainte en fonction des résultats. Au cours de cette estimation, on peut montrer que le calcul de la surface isovitesse converge vers la solution avec une précision  $\epsilon$  donnée par la relation IV.11.

$$\epsilon = \frac{\dot{\epsilon}^{II} - \dot{\epsilon}_{cible}^{II}}{\dot{\epsilon}_{cible}^{II}} = \frac{1}{2^n} \quad (IV.11)$$

avec  $n$  le nombre d'itérations.

On représente sur la figure IV.6 un exemple d'estimation dichotomique d'une surface isovitesse dans le plan de contrainte  $(\Sigma_{\theta\theta}, \Sigma_{zz})$ . Pour chaque point de simulation, on représente la valeur de la précision  $\epsilon$ . On se fixe un critère de précision  $\epsilon < 1\%$  ce qui conduit à 7 itérations par trajet de chargement  $\beta$  pour converger sur la surface isovitesse cible.

### IV.2.5.2 Simulation des surfaces isovitesse avec le modèle polycristallin

On utilise l'algorithme décrit dans la partie précédente pour simuler les surfaces isovitesse avec le modèle polycristallin. On représente les résultats sur la figure IV.6(b) pour trois vitesses cibles  $\dot{\epsilon}_{eq}^{vp} = 10^{-9}, 10^{-8}$  et  $10^{-7} \text{s}^{-1}$ . On compare ces résultats aux vecteurs d'écoulement en stade II obtenus expérimentalement. Il semble alors que le modèle polycristallin permette une bonne description de l'anisotropie de comportement en fluage thermique.

## IV.2.6 Impact du glissement dévié dans le modèle polycristallin

Par manque de temps, nous n'avons pu qu'ébaucher l'analyse du rôle du glissement dévié sur le comportement en fluage. Nous proposons une étude qualitative afin d'appréhender l'impact du glissement dévié sur le comportement en fluage et en relaxation. Les coefficients du glissement dévié utilisés dans les simulations sont détaillés dans le tableau IV.4. Une première identification du modèle nous indique que le glissement dévié, tel qu'il est modélisé dans notre approche, permet de diminuer fortement la valeur de la distance critique d'annihilation des dislocations prismatiques trouvée sans glissement dévié.

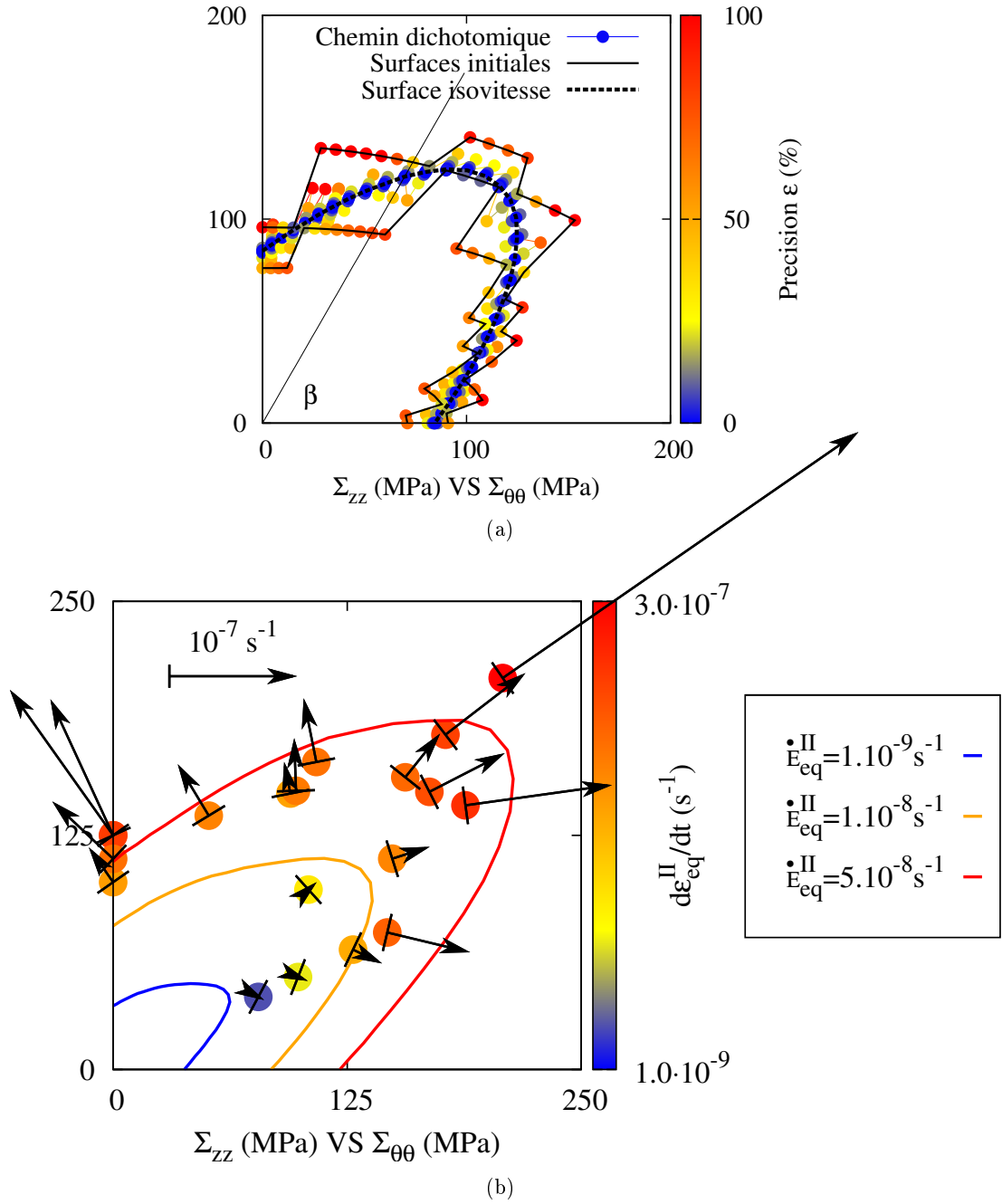


FIG. IV.6 – (a) Exemple d'estimation dichotomique d'une surface isovitesse dans le plan  $(\Sigma_{\theta\theta}, \Sigma_{zz})$  obtenue avec le modèle macroscopique (voir section IV.3.6) pour une vitesse cible  $\dot{\epsilon}_{cible}^{\Pi} = 10^{-7} s^{-1}$  et (b) simulation des surfaces isovitesse à 400°C dans le plan  $(\Sigma_{\theta\theta}, \Sigma_{zz})$  avec le modèle polycristallin.

| Paramètre     | Descriptif                                 | Unité   | Valeur         |
|---------------|--|---------|----------------|
| $\beta_{CS}$  | Terme préexponentiel                       | -       | $0,44.10^{-2}$ |
| $\tau_0^{CS}$ | Cission critique de glissement dévié       | MPa     | 7              |
| $k^{CS}$      | Terme de production                        | $b$     | 50             |
| $y_{CS}$      | Distance critique d'annihilation effective | $\mu m$ | 71             |
| $V_{CS}$      | Volume d'activation                        | $b^3$   | 44             |

---

TAB. IV.4 – Coefficients du glissement dévié utilisés dans la modélisation polycristalline.

Nous représentons, sur les figures IV.7, l'effet du glissement dévié sur le comportement en fluage aux échelles macroscopique et microscopique. Sur les figures de gauche, la simulation des essais de fluage pour  $\beta = +\infty$ ,  $\beta = 1,5$  et  $\beta = 0,5$  avec ou sans glissement dévié nous indique que le glissement impacte très peu le comportement en fluage. A l'échelle microscopique, nous représentons sur les figures de droite, la distribution des probabilités moyenne de glissement dévié dans le triangle standard obtenue à la fin de la simulation des essais de fluage analysés précédemment. Contrairement à ce que l'on aurait pu penser en confrontant la texture cristallographique d'un alliage de zirconium recristallisé avec les isovaleurs des facteurs de Schmid pyramidaux (voir Fig.II.12), ce n'est pas la sollicitation avec  $\beta = 1,5$ , qui est la plus favorable au glissement dévié. En effet, on observe que la moyenne des probabilités de glissement dans le polycristal est beaucoup plus faible pour  $\beta = 1,5$  et  $\beta = 0,5$  que pour  $\beta = +\infty$ . Ce résultat doit provenir du fait que l'activité plastique des systèmes de glissement prismatique est plus intense en traction suivant  $z$  que pour des sollicitations biaxées, il en résulte alors une probabilité de déviation sur les plans pyramidaux plus importante. Enfin, on représente l'effet du glissement dévié sur le comportement en relaxation sur la figure IV.8. On observe que le glissement dévié permet d'augmenter le taux de relaxation de la contrainte. La distribution des probabilités de déviation dans le triangle standard (Fig. IV.8(b)) nous indique que de nombreux grains ont saturé en terme de probabilité ( $P_{CS}=1$ ) sans relation apparente avec leur orientation cristallographique.

#### IV.2.7 Analyse des résultats à l'échelle des grains

Les résultats à l'échelle des grains sont analysés sans le mécanisme de glissement dévié. Le jeu de coefficients utilisés pour les simulations est celui présenté dans le tableau IV.3. Pour analyser les résultats obtenus en fluage à l'échelle des phases du polycristal, nous représentons sur les figures IV.9, IV.10 et IV.11, la distribution au sein du polycristal des contraintes en fonction des déformations plastiques. La valeur moyenne correspondant à la grandeur macroscopique est également représentée. L'expression de la contrainte équivalente de von Mises étant non linéaire en  $\underline{\underline{\sigma}}$ , la moyenne des contraintes équivalentes ne coïncide pas avec la valeur de la contrainte équivalente moyenne :

$$\langle J_2(\underline{\underline{\sigma}}^\varphi) \rangle \neq J_2(\langle \underline{\underline{\sigma}}^\varphi \rangle) \quad (IV.12)$$

On observe sur ces figures que la règle en  $\beta$  permet de décrire une hétérogénéité en déformation plastique beaucoup plus importante que celle obtenue par le modèle de

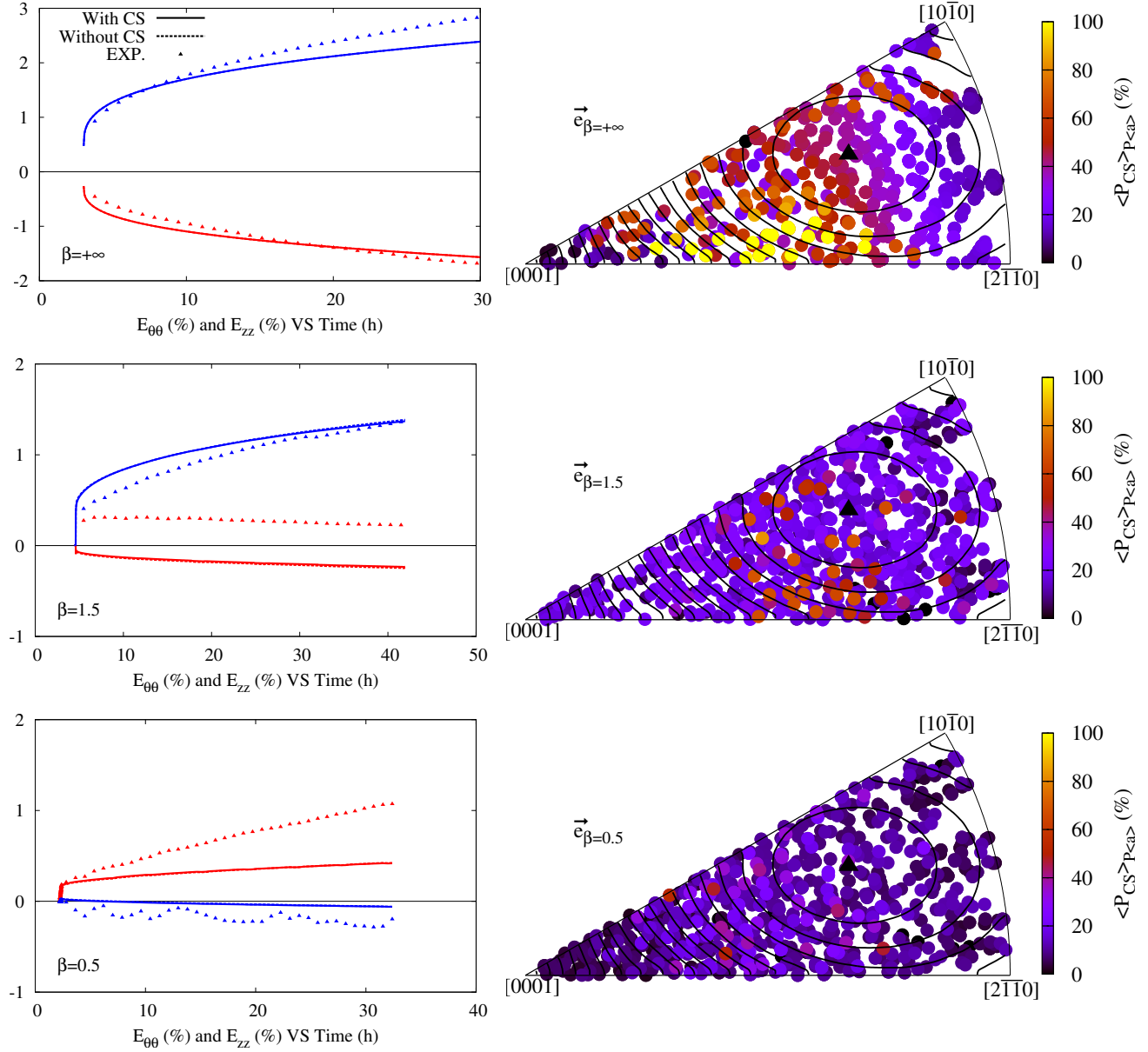


FIG. IV.7 – Impact du glissement dévié sur la modélisation du comportement en fluage à l'échelle macroscopique (à gauche) et microscopique (à droite) : simulation avec le modèle polycristallin de différents essais de fluage et de la distribution des probabilités moyenne de glissement dévié dans le triangle standard pour trois essais de fluage : (ligne 1)  $\beta = +\infty$ , (ligne 2)  $\beta = 1,5$  et (ligne 3)  $\beta = 0,5$ . Confrontation des résultats aux courbes isovalues des facteurs de Schmid des systèmes de glissement  $\pi_1 \langle a \rangle$

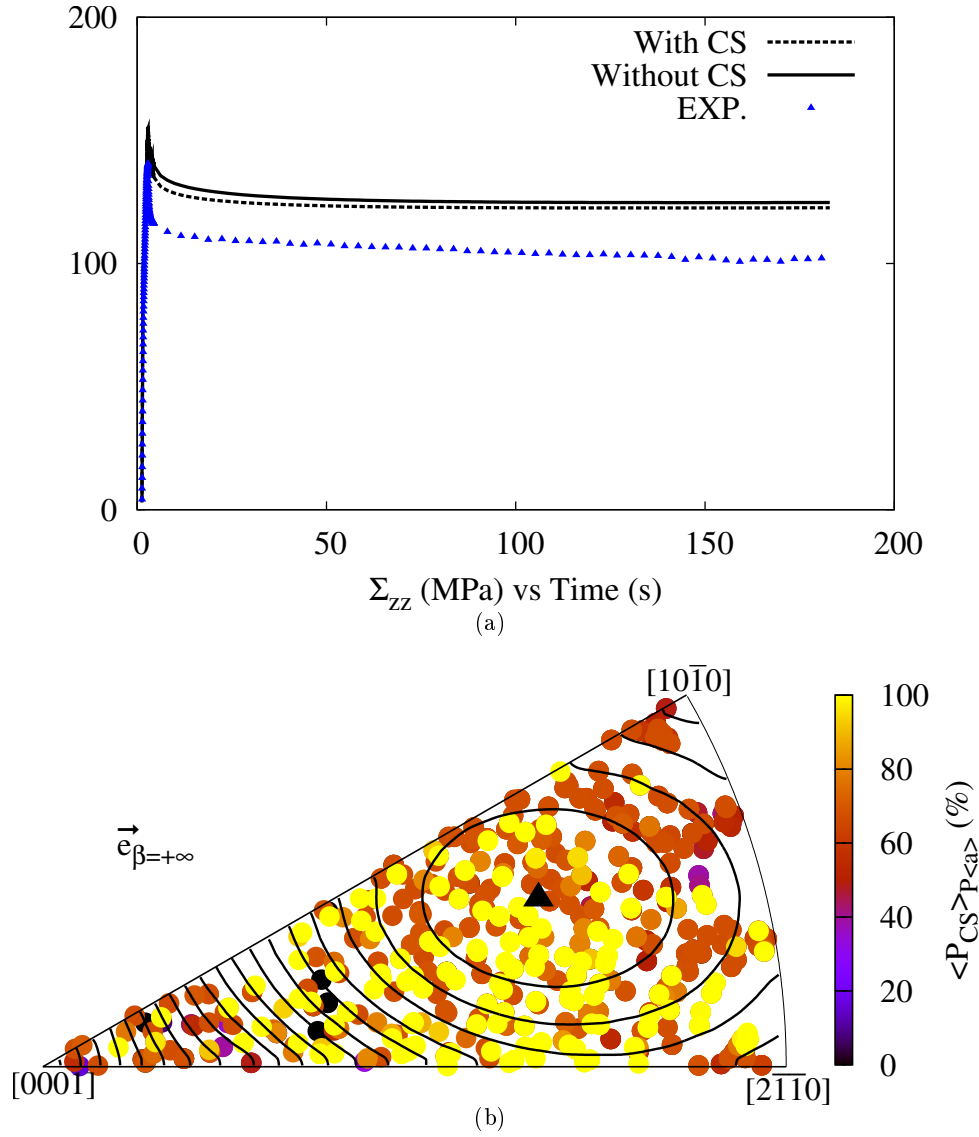


FIG. IV.8 – Impact du glissement dévié sur la modélisation du comportement en relaxation. (a) Effet sur le comportement macroscopique et (b) distribution des probabilités moyenne de glissement dévié dans le triangle standard.

Kröner. Sur ces figures, la distribution de déformations plastiques équivalentes obtenues à la fin des essais de fluage est également représentée dans le triangle standard. Pour l'essai de fluage uniaxial, on observe que les phases les plus déformées plastiquement sont les phases favorablement orientées pour le glissement prismatique. En revanche, pour l'essai en pression pure ( $\beta = 0,5$ ), en conservant la même direction de projection que pour l'analyse du fluage uniaxial, on observe que les phases peu déformées en fluage uniaxial se déforment plus pour un essai de fluage en pression pure. L'essai pour lequel  $\beta = 1,5$  est une configuration intermédiaire dans laquelle la déformation est plus homogène au sein du polycristal.

Le nombre de variables internes très important introduit dans le modèle polycristallin et son coût de calcul associé rend son implémentation industrielle inutile avec les moyens de calcul actuels. Par contre, il est probable que cette classe de modèle pourra être appliquée sans difficulté dans une dizaine d'années. En attendant le développement de nouvelles machines, nous proposons, dans la partie suivante, une méthode permettant l'utilisation de modèles simplifiés se fondant sur des bases micromécaniques.

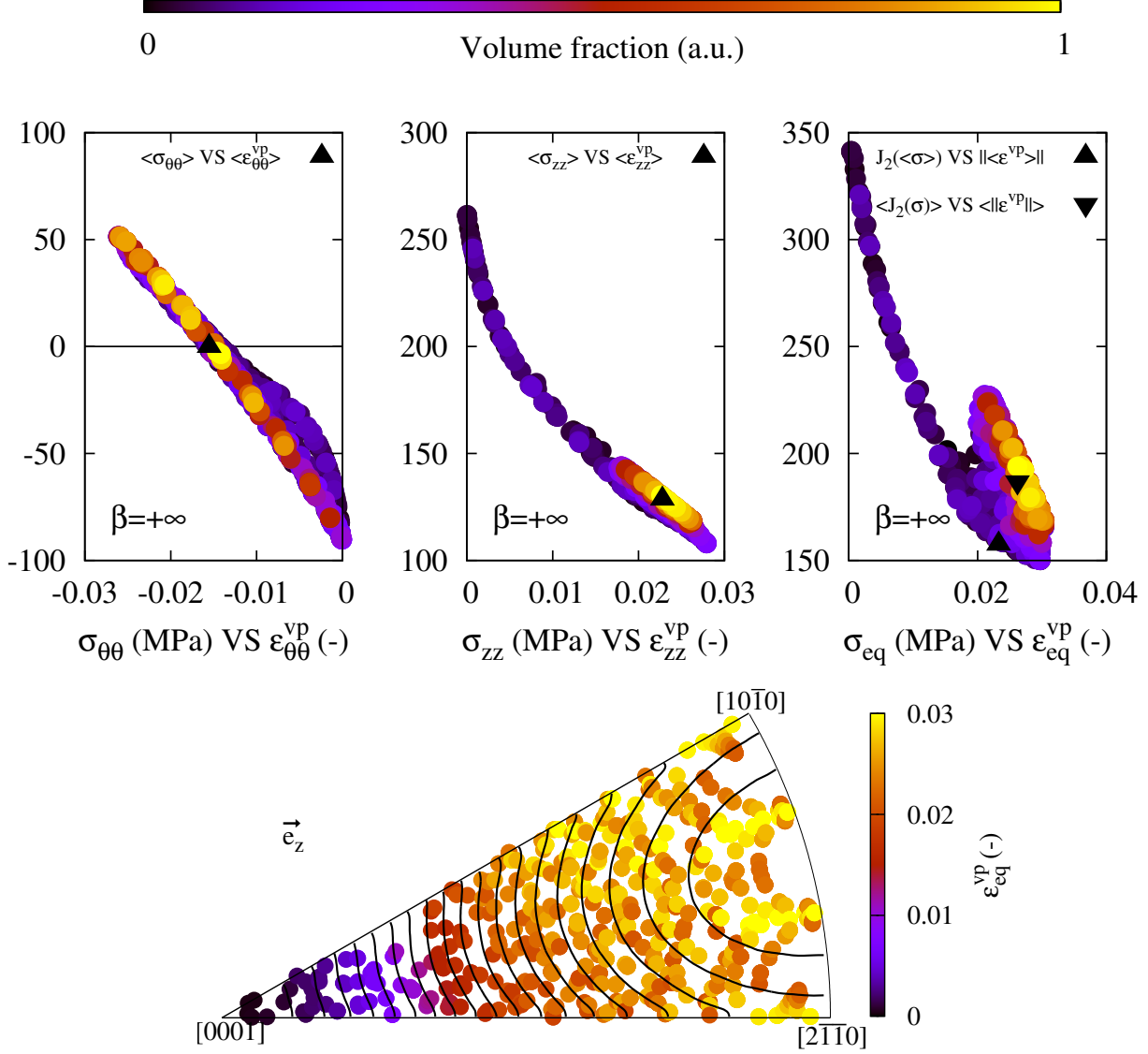


FIG. IV.9 – Simulation avec le modèle polycristallin (règle en  $\beta$ ) d'un essai de fluage uniaxé ( $\beta = +\infty / \Sigma_{zz} = 125$  MPa) d'une durée de 30 heures : distribution dans le polycristal des contraintes axiale, circonférentielle et de von Mises en fonction des déformations plastiques correspondantes et distribution dans le triangle standard des déformations plastiques équivalentes.

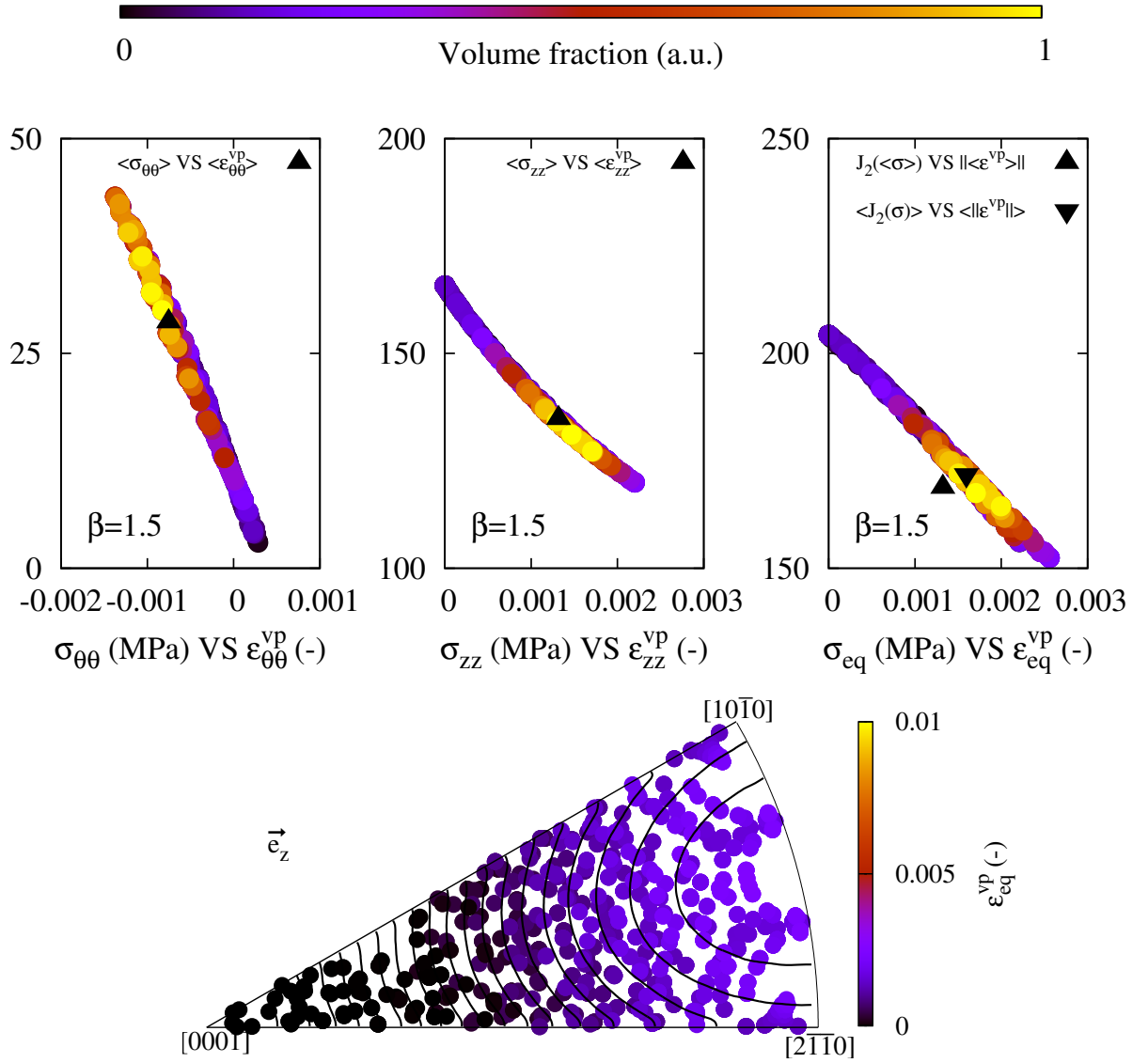


FIG. IV.10 – Simulation avec le modèle polycristallin (règle en  $\beta$ ) d'un essai de fluage biaxé ( $\beta = 1,5/\Sigma_{\theta\theta} = 110\text{MPa}$ ) d'une durée de 42 heures : distribution dans le polycristal des contraintes axiale, circonférentielle et de von Mises en fonction des déformations plastiques correspondantes et distribution dans le triangle standard des déformations plastiques équivalentes.



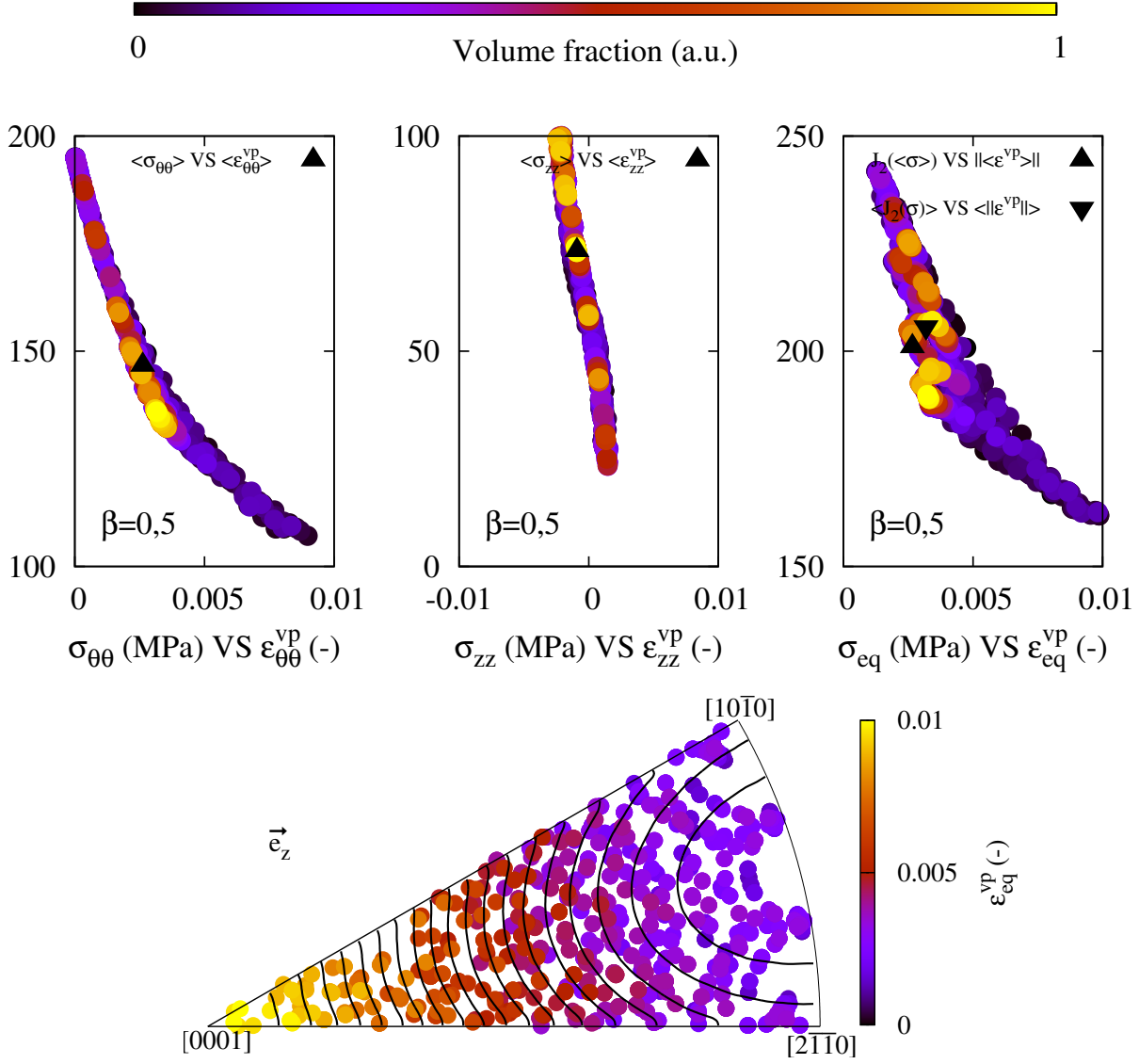


FIG. IV.11 – Simulation avec le modèle polycristallin (règle en  $\beta$ ) d'un essai de fluage uniaxé ( $\beta = 0,5/\Sigma_{\theta\theta} = 150$  MPa) d'une durée de 32 heures : distribution dans le polycristal des contraintes axiale, circonférentielle et de von Mises en fonction des déformations plastiques correspondantes et distribution dans le triangle standard des déformations plastiques équivalentes.

### IV.3 Modélisation macroscopique du comportement EVP

Le nombre de variables internes introduites dans l'approche micromécanique ne permet pas son utilisation directe dans un code de calcul industriel à l'heure actuelle. Or, le dimensionnement d'une structure nécessite l'usage de lois de comportement robustes et efficaces pour fournir des réponses rapides aux concepteurs. L'objectif de cette partie est de montrer comment tirer profit des résultats obtenus par un modèle polycristallin dans une approche macroscopique. Pour illustrer cet aspect, nous allons utiliser le modèle polycristallin proposé par Geyer [Geyer 99a] pour décrire l'anisotropie de comportement à température ambiante d'un alliage de Zy-4 recristallisé. Ce modèle va être utilisé comme une machine d'essais numériques permettant d'accéder à la surface de charge de cet alliage à 20°C pour lequel des données expérimentales sont disponibles [Robinet 95].

#### IV.3.1 Surface de charge

La surface de charge d'un matériau élastoviscoplastique peut être vue comme l'extension tridimensionnelle de la notion de domaine d'élasticité en 1D. Elle est définie comme le lieu des points dans l'espace des contraintes où la déformation plastique équivalente atteint un offset donné. La surface de charge est donc une hypersurface dans un espace de dimension 6. De la même manière que la limite d'élasticité, la surface de charge d'un matériau est définie pour un offset de déformation plastique équivalente fixé. Finalement, la notion de surface de charge est très proche de la notion de surface isovitesse introduite pour les essais de fluage précédemment. La formalisation mathématique du concept de surface de charge à l'échelle macroscopique conduit à l'écriture d'une fonction de charge  $F$  (voir Eq.IV.13) qui prend des valeurs négatives dans le domaine d'élasticité et nulles sur la surface de charge.

$$F(\underline{\underline{\Sigma}}) = f(\underline{\underline{\Sigma}}) - \Sigma_y \quad (\text{IV.13})$$

On introduit dans cette fonction de charge ( $F$ ) une contrainte équivalente  $f$  et une limite d'élasticité  $\Sigma_y$  que l'on fixe conventionnellement pour une sollicitation de traction uniaxiale. La fonction  $f$  permet de calculer une contrainte équivalente scalaire de l'état de contrainte  $\underline{\underline{\Sigma}}$ . On peut faire le choix d'une contrainte équivalente de von Mises ou de Tresca pour décrire le comportement d'un matériau isotrope. Toutefois, pour décrire une situation anisotrope, le choix est plus vaste. Classiquement, on utilise le critère quadratique de Hill en introduisant six coefficients d'anisotropie dans le calcul de la contrainte équivalente mais ce critère peut, dans certains cas, montrer des incohérences entre l'anisotropie de déformation et celle en contrainte. Concernant la diversité des fonctions  $f(\underline{\underline{\Sigma}})$  proposées, on peut par exemple penser aux travaux de Karafillis et Boyce [Karafillis 93] ou de Bron et Besson [Bron 04] qui définissent des contraintes équivalentes très générales permettant de modéliser un comportement anisotrope spécifique. L'inconvénient principal de ces expressions est le grand nombre de coefficients matériau à déterminer.

### IV.3.2 Du polycristal à une modélisation phénoménologique

Afin de remédier à cette difficulté, nous proposons dans ce paragraphe une démarche permettant d'associer les observations obtenues en MET et l'anisotropie du comportement simulée par le modèle polycristallin dans le but de proposer un modèle multi-surfaces fondé sur des bases micromécaniques et utilisable dans un code de calcul par EF.

#### IV.3.2.1 Observations expérimentales

Pour les alliages de zirconium entre 20°C et 400°C, il est désormais acquis que le glissement prismatique des dislocations est le vecteur principal de la plasticité dans la plupart des conditions thermomécaniques rencontrées dans cette étude (petites déformations). En traction uniaxiale et à température ambiante, ce mécanisme explique quasiment à lui seul le comportement du matériau. En revanche, pour des sollicitations multiaxiales de type traction-pression interne, des systèmes de glissement secondaires tels que le glissement pyramidal s'activent. D'après les résultats de Geyer obtenus pour un alliage de Zy-4 à température ambiante (cf Fig. IV.12), une analyse statistique des mécanismes activés confirme ce résultat. A la lumière de ces constats expérimentaux, l'idée est de construire un modèle multimécanisme [Sai 93, Cailletaud 95, Geuffrard 06, Sai 07] en séparant la contribution prismatique (P) à l'écoulement viscoplastique de la contribution Non Prismatique (NP).

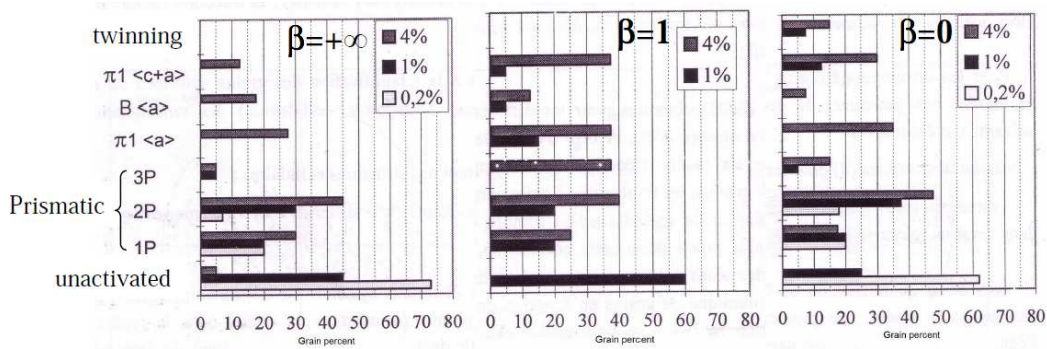


FIG. IV.12 – Activation relative des différents mécanismes de glissement observés pour un alliage Zy-4 recristallisé à 20°C pour différents niveaux de déformation plastique équivalente (0.2%, 1% et 4%) et biaxialité du chargement ( $\beta = \Sigma_{zz}/\Sigma_{\theta\theta}$ ) [Geyer 99a].

#### IV.3.2.2 Vers une modélisation multi-surfaces

Le modèle polycristallin utilisé dans cette partie correspond à celui des travaux de thèse de Geyer [Geyer 99a]. Les coefficients du modèle et notamment les cisssions critiques des différents mécanismes de glissement sont rappelés dans le tableau IV.5 [Pilvin 97]. Ces coefficients sont issus d'analyses expérimentales en MET pour certains et d'une procédure d'identification sur une base d'essais à 20°C pour les autres. La base

### IV.3 Modélisation macroscopique du comportement EVP

| Paramètre                  | Unité    | Descriptif                         | Valeur                |
|----------------------------|----------|------------------------------------|-----------------------|
| E                          | GPa      | Module de Young                    | 105                   |
| $\nu$                      | -        | Coefficient de Poisson             | 0,43                  |
| $\rho_0$                   | $m^{-2}$ | Densité de dislocations initiale   | $1,14 \cdot 10^{+11}$ |
| $y_s$                      | $b$      | Rayon de capture d'une dislocation | 1,2                   |
| $\dot{\gamma}_0$           | $s^{-1}$ | Terme préexponentiel               | $7,8 \cdot 10^{-10}$  |
| c                          | nm       | Paramètre de maille                | 0,514                 |
| a                          | nm       | Paramètre de maille                | 0,323                 |
| $\tau_0^{P< a >}$          | MPa      | CRSS                               | 65,6                  |
| $\tau_0^{\pi_1 < a >}$     | MPa      | CRSS                               | 84,6                  |
| $\tau_0^{B < a >}$         | MPa      | CRSS                               | 132,5                 |
| $\tau_0^{\pi_1 < c + a >}$ | MPa      | CRSS                               | 190,9                 |
| $V^{P < a >}$              | $b^3$    | Volume d'activation                | 19,2                  |
| $V^{\pi_1 < a >}$          | $b^3$    | Volume d'activation                | 16,5                  |
| $V^{B < a >}$              | $b^3$    | Volume d'activation                | 13,3                  |
| $V^{\pi_1 < c + a >}$      | $b^3$    | Volume d'activation                | 6,2                   |

TAB. IV.5 – Coefficients du modèle polycristallin utilisé pour décrire le comportement du Zy-4 recristallisé à 20°C

d'identification contient des essais d'écroutissage dans différentes directions de chargement  $\beta$  et le modèle ainsi identifié permet une bonne description du comportement mécanique et de son anisotropie en utilisant une FDOC de 1113 orientations obtenue par une analyse vectorielle [Bacroix 90].

Pour simuler la surface de charge de cet alliage, on choisit d'abord le plan de coupe de la surface que l'on souhaite déterminer. Puis dans ce plan, on sollicite le matériau suivant une direction de chargement  $\beta$  donnée et on relève l'état de contrainte pour lequel la déformation plastique atteint l'offset. On réitère cette opération sur un ensemble de directions  $\beta$  afin de déterminer de proche en proche la surface de charge. Dans cette étude, les chargements sont réalisés avec une vitesse de déformation équivalente de  $\dot{\epsilon} = 10^{-3} s^{-1}$ .

La modélisation polycristalline permet de mesurer indépendamment l'influence de chaque mécanisme de déformation sur le comportement macroscopique. Si l'on souhaite désactiver un mécanisme au cours d'une simulation, il suffit d'augmenter la cission critique correspondante. De cette manière, on peut facilement calculer la surface de charge associée à tous les mécanismes de glissement du modèle polycristallin. Sur les graphiques de la figure IV.13, nous traçons dans le plan  $(\Sigma_{zz}, \Sigma_{\theta\theta})$ , les surfaces de charge associées aux mécanismes  $P< a >$ ,  $B< a >$ ,  $\pi_1 < a >$  et  $\pi_1 < c + a >$  pour trois offsets différents. On observe que pour les premiers stades de l'écoulement plastique, c'est le mécanisme prismatique qui pilote la limite d'élasticité du matériau dans toutes les directions de chargement  $\beta$ . En revanche, lorsque le niveau de déformation plastique augmente, les

mécanismes de glissement non prismatiques s'activent de façon plus importante en accord avec les observations MET de Geyer (voir Fig.IV.12) surtout autour de la direction  $\beta = 1/2$  correspondant à une sollicitation en pression interne pure.

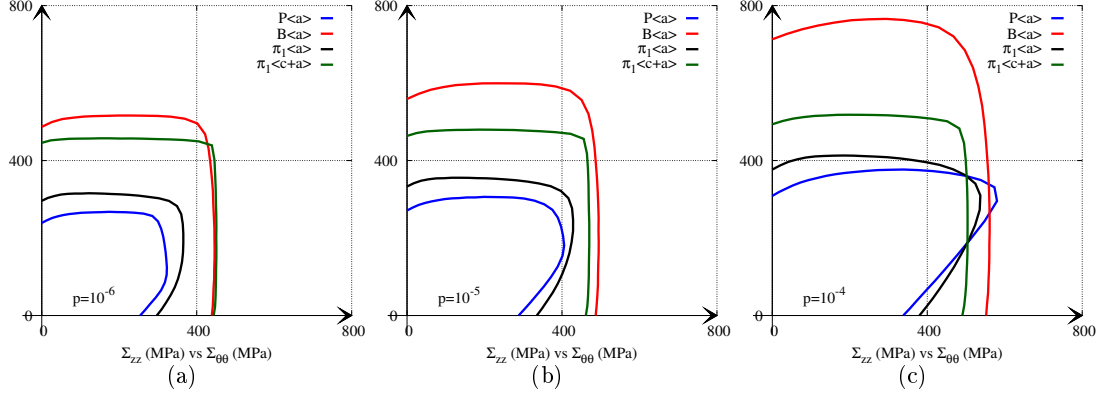


FIG. IV.13 – Surfaces de charge dans le plan  $(\Sigma_{zz}, \Sigma_{\theta\theta})$  associées aux mécanismes de glissement simulés par le modèle polycristallin à 20°C pour des offsets de (a)  $10^{-6}$ , (b)  $10^{-5}$  et (c)  $10^{-4}$ .

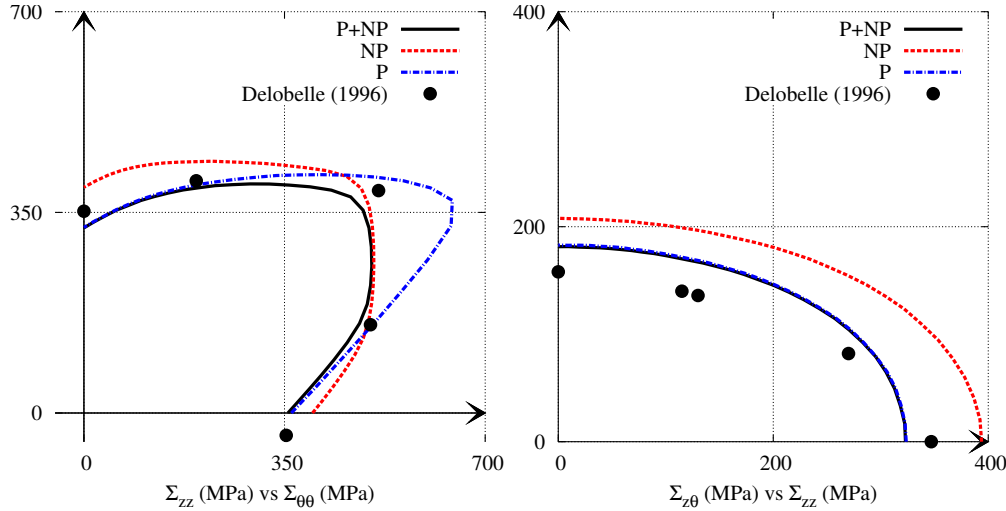


FIG. IV.14 – Surfaces de charge Prismatique et Non Prismatique simulées par le modèle polycristallin pour un offset  $p = 2.10^{-4}$  dans les plans  $(\Sigma_{\theta\theta}, \Sigma_{zz})$  et  $(\Sigma_{z\theta}, \Sigma_{zz})$ . Les surfaces numériques sont confrontées aux données expérimentales issues de [Delobelle 96].

Sur les graphiques de la figure IV.14, les surfaces de charge Prismatique et Non Prismatique\* simulées par le modèle polycristallin sont tracées dans les plans  $(\Sigma_{\theta\theta}, \Sigma_{zz})$

\*Pour simuler les surfaces de charge Non Prismatique, on autorise dans les simulations tous les mécanismes à l'exception du mécanisme prismatique

et  $(\Sigma_{zz}, \Sigma_{z\theta})$ . Expérimentalement, cela revient respectivement à solliciter un tube mince en traction/pression et en traction/torsion. Les surfaces simulées avec l'ensemble des mécanismes de déformation (P+NP) sont également représentées sur ces graphiques. Delobelle et Robinet ont réalisé ce type de sollicitations combinées pour tester la validité de leur modèle [Delobelle 96]. Nous montrons sur les figures IV.14 que le modèle utilisé ici permet de représenter ces données expérimentales avec une bonne approximation. L'accord modèle-expérience est néanmoins moins bon pour la surface de charge en traction-torsion.

### IV.3.3 Critère d'écoulement mixte

Afin de proposer un critère d'écoulement qui soit compatible avec le modèle polycristallin [Priser 09], nous avons simulé les surfaces de charge dans de nombreux plans de coupe (voir Fig.IV.16). Il ressort de ces simulations que la forme des surfaces de charge est "aplatie" dans les plans des composantes diagonales  $(\Sigma_{rr}, \Sigma_{\theta\theta}, \Sigma_{zz})$  alors qu'elles sont beaucoup "plus arrondies" dans les plans des composantes hors diagonale  $(\Sigma_{r\theta}, \Sigma_{\theta z}, \Sigma_{zr})$ . En conséquence, ni un critère quadratique de Hill [Hill 50], ni un critère non quadratique de Hosford [Hosford 72] ne sont capables de reproduire ces simulations numériques. Pour résoudre ce problème, nous proposons d'associer un critère non quadratique sur les composantes diagonales et un critère quadratique sur les autres composantes selon la relation IV.14.

$$f(\underline{\Sigma}) = \sqrt{\kappa H_{2m}^2 + 2(1 - \kappa)G_2^2}$$

$$\text{avec : } \begin{cases} H_{2m}(\underline{\Sigma}) &= \left[ H_r (\Sigma_{\theta\theta} - \Sigma_{zz})^{2m} + H_\theta (\Sigma_{zz} - \Sigma_{rr})^{2m} + H_z (\Sigma_{rr} - \Sigma_{\theta\theta})^{2m} \right]^{\frac{1}{2m}} \\ G_2(\underline{\Sigma}) &= \left[ 3(G_r \Sigma_{\theta z}^2 + G_\theta \Sigma_{zr}^2 + G_z \Sigma_{r\theta}^2) \right]^{\frac{1}{2}} \end{cases} \quad (\text{IV.14})$$

Dans ces expressions,  $H_r$ ,  $H_\theta$ ,  $H_z$ ,  $G_r$ ,  $G_\theta$  et  $G_z$  sont les coefficients d'anisotropie attachés à la contrainte équivalente  $f$ ,  $m$  est le paramètre de non-quadraticité et  $\kappa$  un paramètre de pondération du critère avec  $0 < \kappa < 1$ . On impose  $m$  entier supérieur à 1 et on cherche les coefficients de ce critère de manière à réduire au maximum les écarts entre les surfaces de charge simulées par ce critère et les résultats obtenus avec le modèle polycristallin. Nous avons simulé avec le modèle polycristallin un ensemble de coupes de la surface de charge pour les mécanismes prismatique et non prismatique et avons obtenu les graphiques présentés à la figure IV.16. Une coupe 3D de la surface de charge pour les composantes hors diagonale est également présentée sur la figure IV.15. La surface simulée par le critère mixte est un ellipsoïde alors que la surface simulée par le modèle polycristallin a tendance à devenir anguleuse lorsque  $\Sigma_{r\theta}$  augmente. Cette remarque constitue un défaut de ce critère mais dans la pratique, cela aura peu d'influence sur la modélisation du comportement car les composantes  $\Sigma_{r\theta}$  restent toujours très faibles pour les sollicitations en réacteur. On observe que le critère d'écoulement mixte proposé permet de décrire convenablement l'ensemble des simulations réalisées par l'intermédiaire du modèle polycristallin à la fois pour les mécanismes prismatique et non prismatique. Cette identification des paramètres du critère mixte sur les surfaces

de charge polycristalline conduit aux valeurs indiquées dans le tableau IV.6. Si l'on choisit la traction uniaxiale suivant  $z$  comme référence, on peut montrer que l'on réduit le nombre de coefficients indépendants grâce à la relation IV.15. On peut également remarquer que l'on retrouve le critère isotrope de von Mises si l'on prend les coefficients  $H_r = H_\theta = H_z = G_r = G_\theta = G_z = 1$ ,  $\kappa = 1/2$  et  $m=1$  ainsi que le critère de Hill si  $m = 1$ . Enfin, si on considère uniquement les composantes diagonales du tenseur des contraintes ( $\Sigma_{\theta z} = \Sigma_{zr} = \Sigma_{r\theta} = 0$ ), on retrouve le critère de Tresca lorsque  $m \rightarrow +\infty$  et  $H_r = H_\theta = H_z = 1$ .

$$H_r + H_\theta = \kappa^{-m} \quad (\text{IV.15})$$

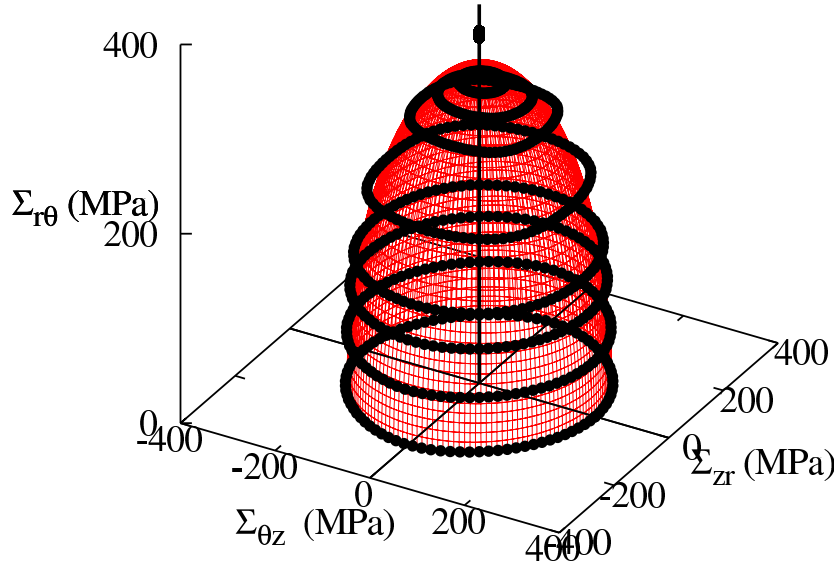


FIG. IV.15 – Surfaces de charge en 3D dans le "plan" de coupe  $(\Sigma_{\theta z}, \Sigma_{zr}, \Sigma_{r\theta})$  simulées par le modèle polycristallin (points) et obtenues avec le critère d'écoulement mixte (grille).

L'identification des coefficients du critère pour le produit étudié (tube de gaine) conduit à des valeurs très éloignées des valeurs isotropes, ce qui montre une forte anisotropie de comportement du Zy-4 à 20°C. On peut remarquer la "non-quadraticité" du mécanisme prismatique est moins marquée que celle du mécanisme non prismatique puisque l'on a  $m_P < m_{NP}$  et  $\kappa_P \sim \kappa_{NP}$ . La valeur des coefficients d'anisotropie en cisaillement ( $G_i$ ) constitue un résultat intéressant de ce travail car, cette valeur souvent inconnue, est fixée par défaut à 1 dans les codes EF industriels. La méthodologie d'identification des coefficients d'anisotropie présentée dans cette partie permet donc de tirer profit des résultats obtenus par le modèle polycristallin qui utilise directement la FDOC du produit étudié.

| Paramètre        | Descriptif                    | Mécanisme<br>Prismatique | Mécanisme<br>Non-Prismatique |
|------------------|-------------------------------|--------------------------|------------------------------|
| $\Sigma_y$ (MPa) | Limite d'élasticité           | 320                      | 388                          |
| $\kappa$         | Paramètre de pondération      | 0,660                    | 0,593                        |
| $m$              | Paramètre de non quadraticité | 2                        | 4                            |
| $H_r$            | Coefficient d'anisotropie     | 1,49                     | 5,09                         |
| $H_\theta$       | Coefficient d'anisotropie     | 0,81                     | 3,02                         |
| $H_z$            | Coefficient d'anisotropie     | 0,02                     | 0,93                         |
| $G_r$            | Coefficient d'anisotropie     | 1,53                     | 1,41                         |
| $G_\theta$       | Coefficient d'anisotropie     | 1,10                     | 1,25                         |
| $G_z$            | Coefficient d'anisotropie     | 0,48                     | 0,92                         |

TAB. IV.6 – Paramètres du critère d'écoulement mixte pour les mécanismes Prismatique et Non Prismatique (Zy-4 recristallisé - T=20°C - offset=2.10<sup>-4</sup>)

#### IV.3.4 Modélisation multimécanisme

A l'instar des travaux de Cailletaud et Sai [Cailletaud 95, Sai 07], nous souhaitons construire un modèle de comportement multimécanisme sur la base des résultats présentés précédemment. Le modèle décrit dans cette partie sera appliqué au comportement EVP à 20°C d'un alliage de Zy-4 avec les données de [Robinet 95] puis à son comportement en fluage à 400°C dans un second temps sur les données de [Grosjean 09]. Dans ce modèle, l'écoulement plastique est associé à la règle de normalité aux surfaces de charge. La vitesse de déformation viscoplastique  $\underline{\dot{E}}^{vp}$  peut s'exprimer en sommant les contributions des mécanismes pris en compte dans cette modélisation selon la relation IV.16.

$$\underline{\dot{E}}^{vp} = \sum_{k=1}^{N_m} \lambda_k \frac{\partial F^k}{\partial \underline{\Sigma}} \quad (\text{IV.16})$$

Dans cette modélisation, on fixe  $N_m = 2$  et l'on considère les mécanismes Prismatique (P) et Non Prismatique (NP). La relation IV.16 devient :

$$\underline{\dot{E}}^{vp} = \lambda_P \frac{\partial F^P}{\partial \underline{\Sigma}} + \lambda_{NP} \frac{\partial F^{NP}}{\partial \underline{\Sigma}} \quad (\text{IV.17})$$

Les multiplicateurs viscoplastiques associés aux mécanismes P et NP caractérisent l'intensité de l'écoulement et sont calculés par la relation IV.18.

$$\lambda_k = \varepsilon_0^k \sinh \left( \frac{[F^k]^+ V_0^k}{k_B T} \right) \text{ avec } k = P \text{ ou } k = NP \quad (\text{IV.18})$$

où  $\varepsilon_0^k$  est une constante du mécanisme  $k$  qui dépend de la température et  $V_0^k$  est le volume d'activation du mécanisme  $k$ , c'est-à-dire la sensibilité à la contrainte de l'écoulement viscoplastique associé au mécanisme  $k$ .



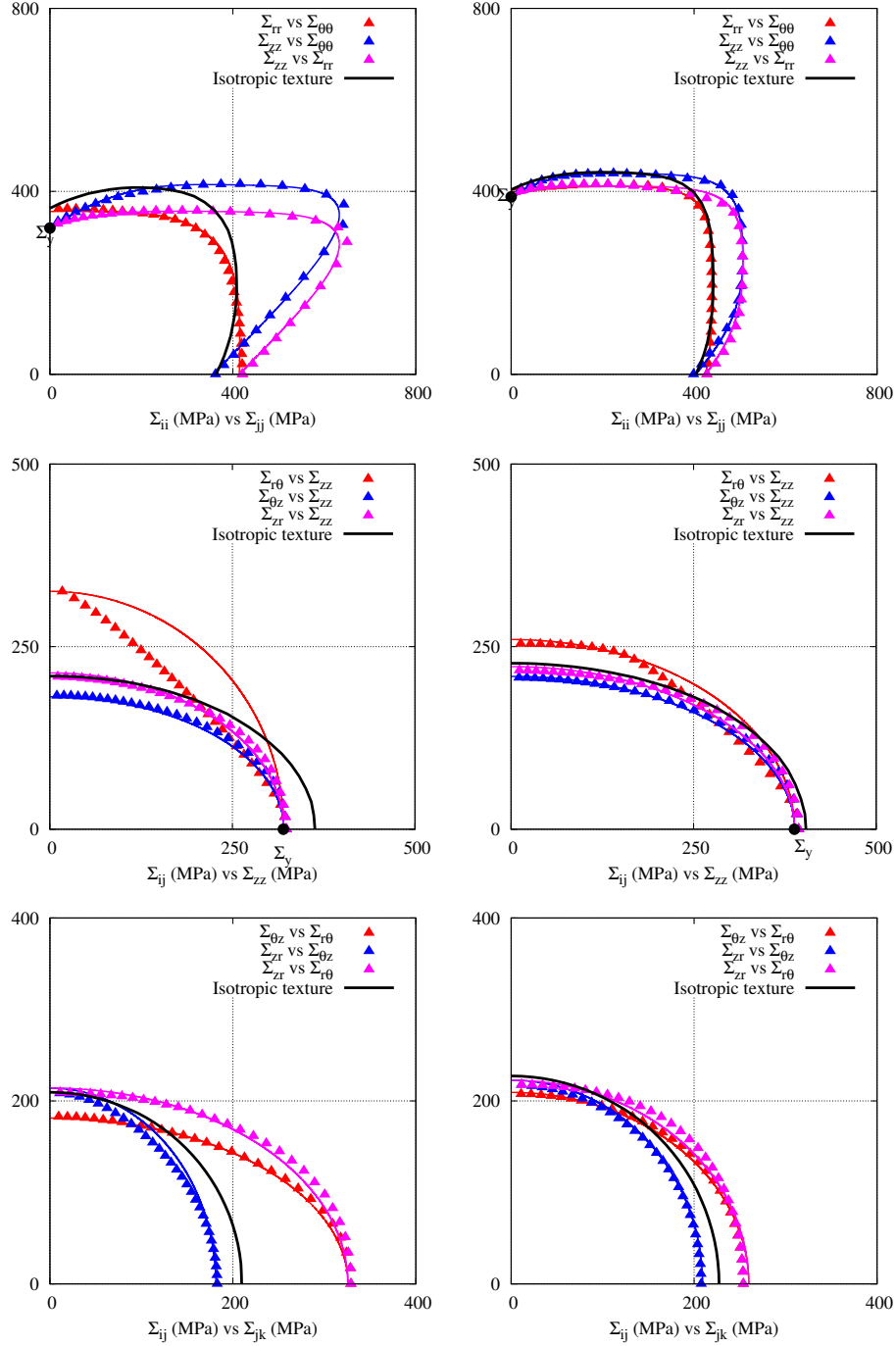


FIG. IV.16 – Fit géométrique du critère mixte pour les mécanismes prismatique (gauche) et non prismatique (droite) sur les surfaces de charges simulées par le modèle polycristallin dans différents plans de coupe pour un offset de  $2 \cdot 10^{-4}$ .

On utilise dans ce modèle de comportement la fonction de charge introduite dans IV.14 pour décrire la forme particulière des surfaces de charge simulées par le biais du modèle polycristallin. La fonction de charge  $F^k$  du mécanisme  $k$  permet d'estimer la direction de l'écoulement viscoplastique au travers de la règle de normalité.

$$F^k = f^k(\underline{\Sigma}) - (\Sigma_y^k + R_k) \quad (\text{IV.19})$$

Dans cette fonction IV.19, il est nécessaire de prendre en compte l'écrouissage du matériau. Nous faisons le choix de modéliser cet écrouissage par une variable isotrope  $R_k$  qui est reliée à la densité de dislocations moyenne  $\rho_k$  du mécanisme  $k$  au travers de la relation IV.20.

$$R_k = \alpha_k \mu b \sqrt{\rho_k + H \rho_{k^*}} \quad (\text{IV.20})$$

où  $H$  est le coefficient qui permet de gérer un éventuel couplage de l'écrouissage entre les mécanismes  $k$  et  $k^*$  (définition univoque car  $N_m = 2$ ) et  $\alpha_k$  est l'analogue macroscopique de la force d'obstacle introduite à l'échelle microscopique pour quantifier l'interaction dislocations/obstacles.

Cet écrouissage isotrope nécessite de connaître la densité de dislocations. Par analogie aux équations usuelles permettant de gérer l'évolution des densités de dislocations dans les modèles polycristallins, on définit pour les deux mécanismes, la loi d'évolution IV.21.

$$\dot{\rho}_k = \frac{\lambda_k}{b} \left( \frac{1}{L^k} - G^k \rho_k \right) \quad (\text{IV.21})$$

Où  $L^k$  et  $G^k$  sont des paramètres associés au mécanisme  $k$ .

### IV.3.5 Application au comportement EVP du Zy-4 à 20°C

On souhaite appliquer le modèle à deux surfaces décrit précédemment au comportement EVP d'un alliage Zy-4 à 20°C car la base de données de Robinet contient des essais de traction-pression interne mais également des essais de traction-torsion.

#### IV.3.5.1 Données expérimentales

La base de données [Robinet 95] pour l'identification du modèle est constituée de neuf essais à vitesse de déformation imposée :

- Deux essais de traction uniaxiale selon l'axe du tube [Robinet 95] basse et haute vitesse pour lesquels :

$$\dot{E}_{zz} = 6,6 \cdot 10^{-7} \text{s}^{-1} ; 6,6 \cdot 10^{-4} \text{s}^{-1} \quad (\text{IV.22})$$

- Trois essais de traction/pression interne [Robinet 95] pour différentes sollicitations avec trajet radial en déformation ( $E_{\theta\theta}, E_{zz}$ ) :

$$C = \frac{\dot{E}_{zz}}{\dot{E}_{\theta\theta}} = +\infty ; 1 ; -2 \text{ avec : } \dot{E}_{VM} = \frac{2}{\sqrt{3}} \sqrt{\dot{E}_{zz}^2 + \dot{E}_{\theta\theta}^2 + \dot{E}_{\theta\theta}\dot{E}_{zz}} = 6,6 \cdot 10^{-4} \text{s}^{-1} \quad (\text{IV.23})$$

- Quatre essais de traction/torsion [Robinet 95] pour différentes sollicitations avec trajet radial en déformation  $(E_{zz}, E_{\theta z})$  :

$$A = \frac{\dot{E}_{z\theta}}{\dot{E}_{zz}} = +\infty ; \sqrt{3} ; \frac{\sqrt{3}}{2} ; \frac{\sqrt{3}}{4} \text{ avec : } \dot{E}_{VM} = \sqrt{\dot{E}_{zz}^2 + \frac{4}{3}\dot{E}_{z\theta}^2} = 6,6 \cdot 10^{-4} \text{s}^{-1} \quad (\text{IV.24})$$

#### IV.3.5.2 Identification du modèle à deux surfaces

Grâce au recalage géométrique des coefficients du critère d'écoulement mixte pour les mécanismes P et NP sur les résultats du modèle polycristallin (section IV.3.3), on connaît complètement les coefficients d'anisotropie des critères d'écoulement  $F^P$  et  $F^{NP}$ . Il reste à définir la contribution à l'écoulement viscoplastique des deux mécanismes. On fait l'hypothèse d'un écrouissage purement isotrope bien que l'on sache qu'un écrouissage cinématique soit nécessaire pour décrire les chargements cycliques. On n'identifie le modèle qu'avec la partie monotone des essais. La stratégie d'identification adoptée ici consiste à figer les coefficients d'anisotropie des critères (voir Table IV.6) et à relâcher les coefficients relatifs à l'écrouissage du matériau au cours du processus d'identification. On s'autorise également à identifier les limites d'élasticité  $\Sigma_y$  des deux mécanismes en imposant la condition  $\Sigma_y^{NP} > \Sigma_y^P$ . Les paramètres du modèle ainsi déterminés sont présentés dans le tableau IV.7.

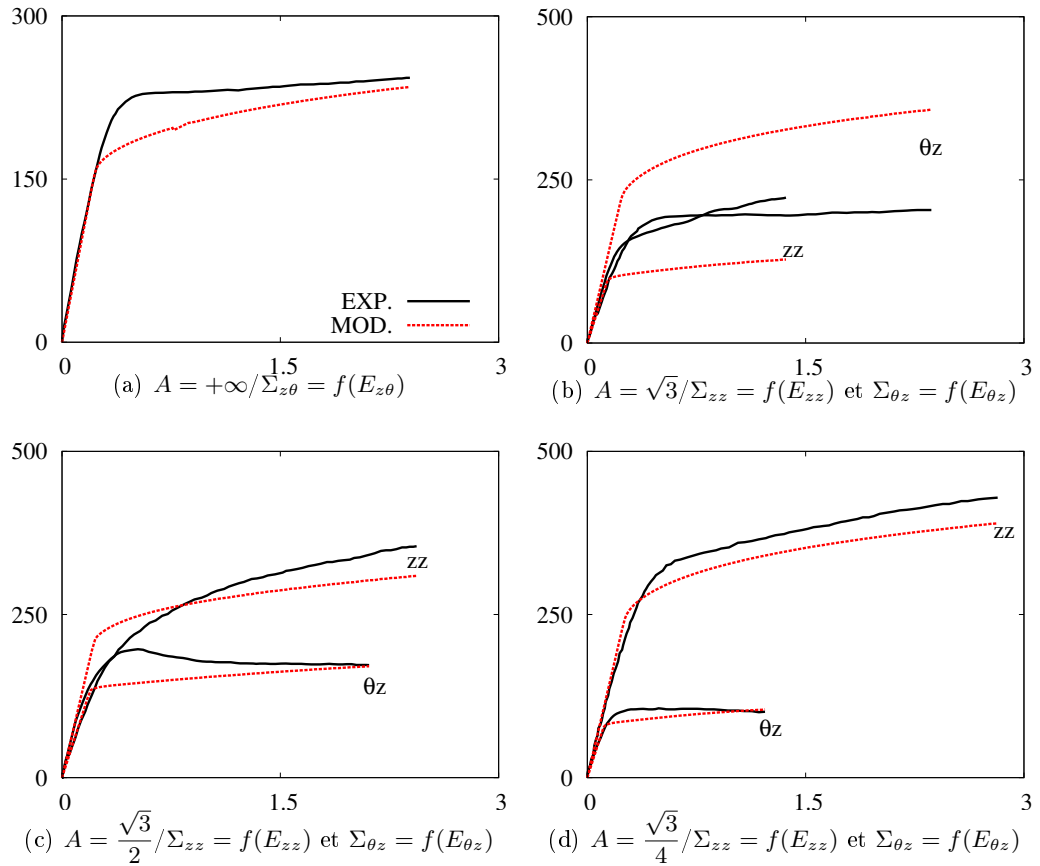
| Paramètre   | Descriptif                       | Unité            | Mécanisme P           | Mécanisme NP          |
|-------------|----------------------------------|------------------|-----------------------|-----------------------|
| E           | Module de Young                  | GPa              |                       | 95                    |
| $\nu$       | Coefficient de Poisson           | -                |                       | 0,37                  |
| b           | Module de vecteur de Burgers     | nm               |                       | 0,323                 |
| $\rho_0$    | Densité de dislocations initiale | m/m <sup>3</sup> |                       | $6,7 \cdot 10^{+10}$  |
| H           | Interaction P/NP                 | -                |                       | 0,10                  |
| $\Sigma_y$  | Limite d'élasticité              | MPa              | 70,1                  | 78,6                  |
| $V_0$       | Volume d'activation              | b <sup>3</sup>   | 41,7                  | 39,9                  |
| $\lambda_0$ | Terme préexponentiel             | s <sup>-1</sup>  | $8,93 \cdot 10^{-35}$ | $1,40 \cdot 10^{-34}$ |
| $\alpha$    | Force d'obstacle macroscopique   | -                | 0,26                  | 0,35                  |
| L           | Libre parcours macroscopique     | b                | 49                    | 66                    |
| G           | Rayon de capture macroscopique   | b                | 25                    | 56                    |

TAB. IV.7 – Identification des coefficients du modèle macroscopique à deux surfaces à 20°C pour un alliage Zy-4 recristallisé.

### IV.3.5.3 Comparaison essais-modèle

Les résultats de l'identification sont présentés sous la forme de courbes contrainte / déformation. Les données expérimentales sont confrontées aux résultats obtenus par le modèle à deux surfaces. Les résultats pour les essais de traction/torsion sont représentés sur la figure IV.17, pour les essais de traction pression/interne sur les figures IV.18(a), IV.18(b) et IV.18(c) et pour les essais de traction sur la figure IV.18(d). Le modèle permet de décrire convenablement la plupart des réponses expérimentales mais a des difficultés avec certains résultats observés en traction/torsion, notamment pour l'essai avec  $A = \sqrt{3}$ .

Cette première application montre l'intérêt de la démarche où, à partir de la donnée de la FDOC d'un produit en alliage de zirconium (tubes ou tôles), il est possible de construire un modèle macroscopique avec une anisotropie maîtrisée si l'on connaît les mécanismes de glissement.



Contrainte (MPa) VS Déformation (%)

FIG. IV.17 – Simulation des essais de traction/torsion par le modèle à deux surfaces.

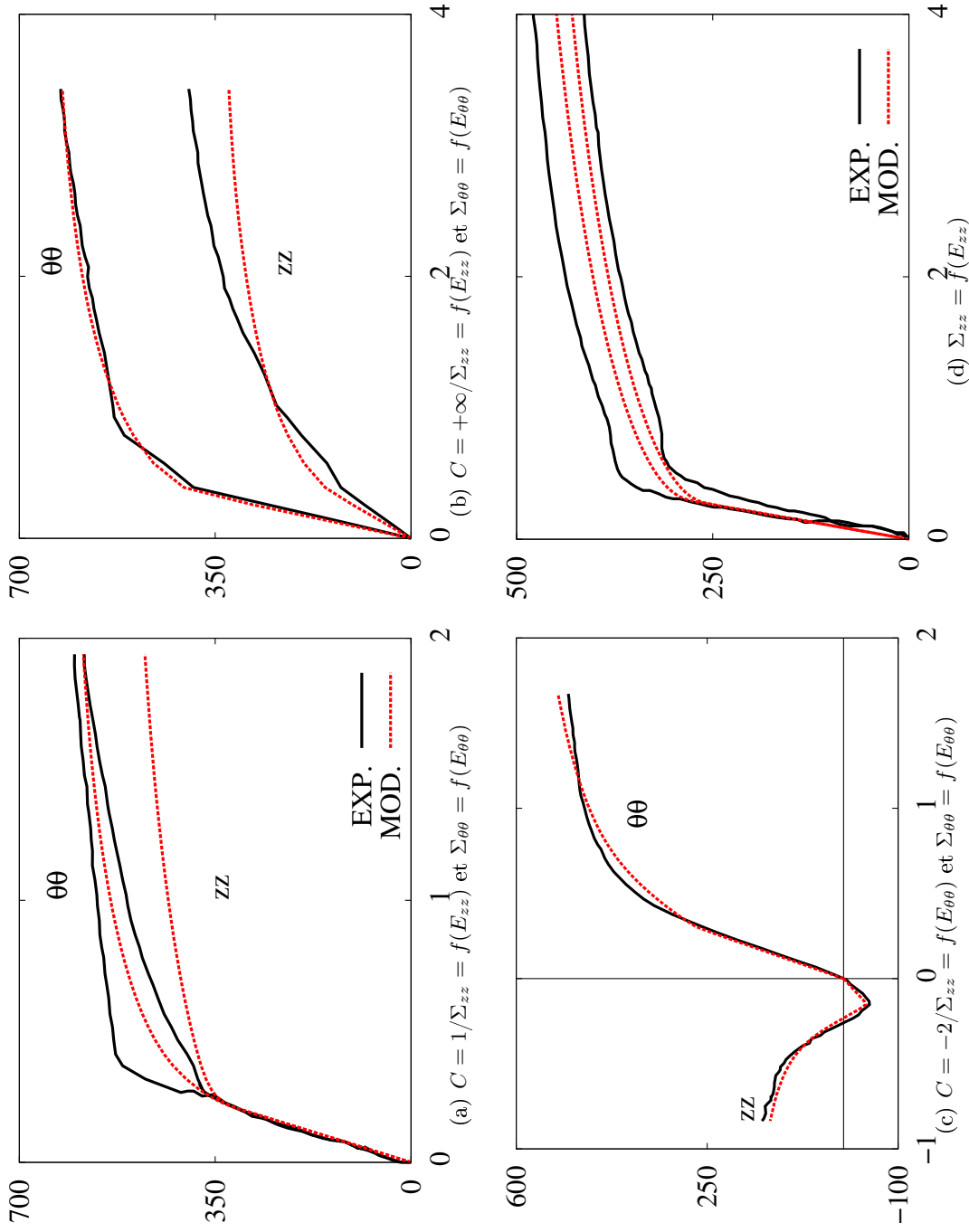


FIG. IV.18 – Simulations (a,b,c) des essais de traction-compression interne et (d) des essais de traction axiale basse et haute vitesse par le modèle à deux surfaces.

**IV.3.6 Application du modèle au fluage du Zy-4 à 400°C**

Dans cette partie, nous appliquons le modèle à deux surfaces au comportement en fluage à 400°C de l'alliage Zy-4 recristallisé étudié dans ce travail.

**IV.3.6.1 Identification du modèle**

La base de données [Grosjean 09] d'identification du modèle est décrite dans le chapitre II relatif au comportement en fluage. Cette base d'identification est constituée de 17 essais de fluage pour différentes biaxialités du chargement comme indiqué dans le tableau IV.8. Dans la procédure d'identification, tous les essais ont un poids identique. Comme pour le modèle polycristallin, les observables utilisées pour identifier le modèle sont les déformations axiales et circonférentielles.

| Biaxialité $\beta$ | Nombre d'essais |
|--------------------|-----------------|
| $+\infty$          | 4               |
| 5,70               | 1               |
| 2,50               | 1               |
| 1,50               | 2               |
| 1,00               | 2               |
| 0,75               | 2               |
| 0,50               | 5               |

TAB. IV.8 – Descriptif de la base de données d'identification du modèle

Dans un premier temps, on veut déterminer les exposants de non quadratricité du critère d'écoulement mixte. Puisque ces paramètres sont entiers, on ne peut pas les déterminer en utilisant une méthode de gradient dans l'espace des nombre réels. On identifie les coefficients du modèle pour un couple  $(m_P, m_{NP})$  donné et on représente sur le graphique IV.19, la valeur de la fonction coût introduite dans le chapitre précédent pour chaque couple d'exposants. On observe que l'écart minimal est obtenu pour  $m_P = 1$  et  $m_{NP} = 3$ . Toutefois, on note que les écarts sont faibles par rapport à un critère de Hill ( $m_P = 1, m_{NP} = 1$ ) et qu'il serait nécessaire d'introduire dans la base de données d'autres trajets de chargement afin d'être en mesure d'estimer les exposants des critères de façon plus fiable. On peut par exemple penser à des essais de fluage pour lesquels  $0 \leq \beta < 0,5$  qui permettraient d'enrichir la base de données sur la "non"quadratricité" des surfaces de charge. On utilisera par la suite les exposants  $m_P = 1$  et  $m_{NP} = 3$  pour décrire les fonctions de charge associées aux deux mécanismes. Enfin, on fixe arbitrairement le paramètre de pondération  $\kappa = 0,5$  car la base de données ne contient pas d'essais de cisaillement. Par conséquent, seuls les coefficients d'anisotropie diagonaux  $H_r$ ,  $H_\theta$  et  $H_z$  seront identifiés pour cette application.

La procédure d'identification conduit à une estimation des coefficients du modèle de comportement qui sont donnés dans le tableau IV.9. On retrouve pour le mécanisme prismatique, une valeur du volume d'activation apparent estimée sur les essais de

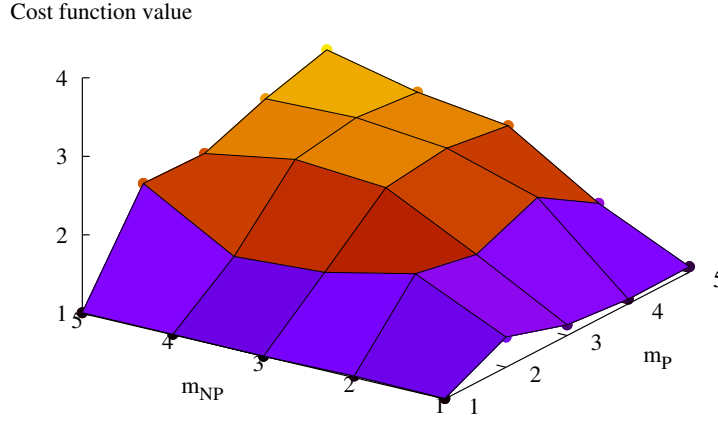


FIG. IV.19 – Identification des exposants des critères associés aux mécanismes P et NP.

relaxation à 400°C proche de  $40b^3$  (cf Tab. II.3).

| Paramètre   | Descriptif                       | Unité            | Mécanisme P          | Mécanisme NP         |
|-------------|----------------------------------|------------------|----------------------|----------------------|
| E           | Module de Young                  | GPa              |                      | 73                   |
| b           | Module de vecteur de Burgers     | nm               |                      | 0,323                |
| $\nu$       | Coefficient de Poisson           | -                |                      | 0,4                  |
| $\rho_0$    | Densité de dislocations initiale | m/m <sup>3</sup> |                      | $0,7 \cdot 10^{+10}$ |
| H           | Interaction P/NP                 | -                |                      | 1,05                 |
| $\Sigma_y$  | Limite d'écoulement              | MPa              | 23,4                 | 48,8                 |
| $V_0$       | Volume d'activation              | $b^3$            | 40                   | 43                   |
| $\lambda_0$ | Terme préexponentiel             | s <sup>-1</sup>  | $1,6 \cdot 10^{-11}$ | $0,7 \cdot 10^{-11}$ |
| $\kappa$    | Paramètre de pondération         | -                |                      | 0,5                  |
| m           | Exposant                         | -                | 1                    | 3                    |
| $H_r$       | Coefficient d'anisotropie        | -                | 0,723                | 0,440                |
| $H_\theta$  | Coefficient d'anisotropie        | -                | 1,277                | 7,560                |
| $H_z$       | Coefficient d'anisotropie        | -                | 0,251                | 0,541                |
| $\alpha$    | Force d'obstacle macroscopique   | -                | 0,163                | 0,424                |
| L           | Libre parcours macroscopique     | b                | 159                  | 129                  |
| G           | Rayon de capture macroscopique   | b                | 68                   | 45                   |

TAB. IV.9 – Identification des coefficients du modèle macroscopique à deux surfaces sur la base de données en fluage à 400°C d'un alliage Zy-4 recristallisé.

#### IV.3.6.2 Simulation des essais de fluage

Si l'on représente, pour un essai de fluage biaxial ( $\beta = 1$ ) et uniaxial ( $\beta = +\infty$ ), la partition de la déformation en une contribution prismatique et une autre non prismatique (voir Fig.IV.20(a) et IV.20(c)), on s'aperçoit que le mécanisme prismatique contribue majoritairement à la déformation pour cette direction de chargement. Le mécanisme Non Prismatique est quasiment inactif en fluage uniaxial alors qu'il l'est pour

l'essai biaxial. Nous représentons sur les figures IV.20(b) et IV.20(d) l'évolution des densités de dislocations Prismatique et Non Prismatique pour trois essais de fluage. Dans le modèle, les densités de dislocations sont associées à l'écroutissage des mécanismes au travers de la relation IV.20. On observe une saturation très rapide des densités qui conduit à un écroutissage saturant des mécanismes et permet l'établissement d'un régime de fluage stationnaire. On remarque de plus une densité toujours plus faible pour le mécanisme NP que pour le mécanisme P. Cette observation est à relier à l'activité plastique plus faible du mécanisme NP par rapport au mécanisme P.

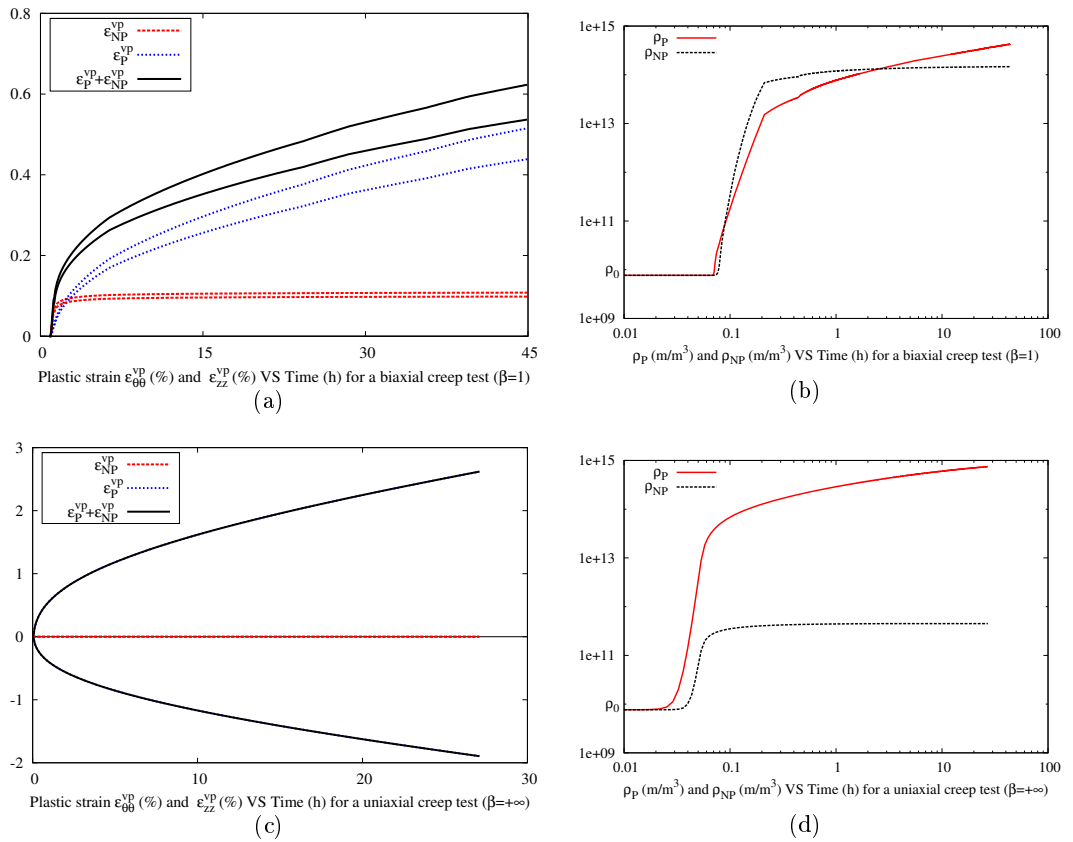


FIG. IV.20 – Simulation de deux essais de fluage avec le modèle à deux surfaces : (a) Partition Prismatique et Non Prismatique de la déformation plastique pour deux essais de fluage (a) biaxial et (c) uniaxial et évolution correspondante des densités de dislocations Prismatique et Non Prismatique.

Enfin, on observe que le modèle à deux surfaces permet une description satisfaisante des déformations axiale et circonférentielle mesurées en fluage comme on peut le constater sur la figure IV.21. Le modèle parvient à décrire la forte anisotropie de comportement en fluage de l'alliage Zy-4 à 400°C et ce pour l'ensemble des trajets de chargement.



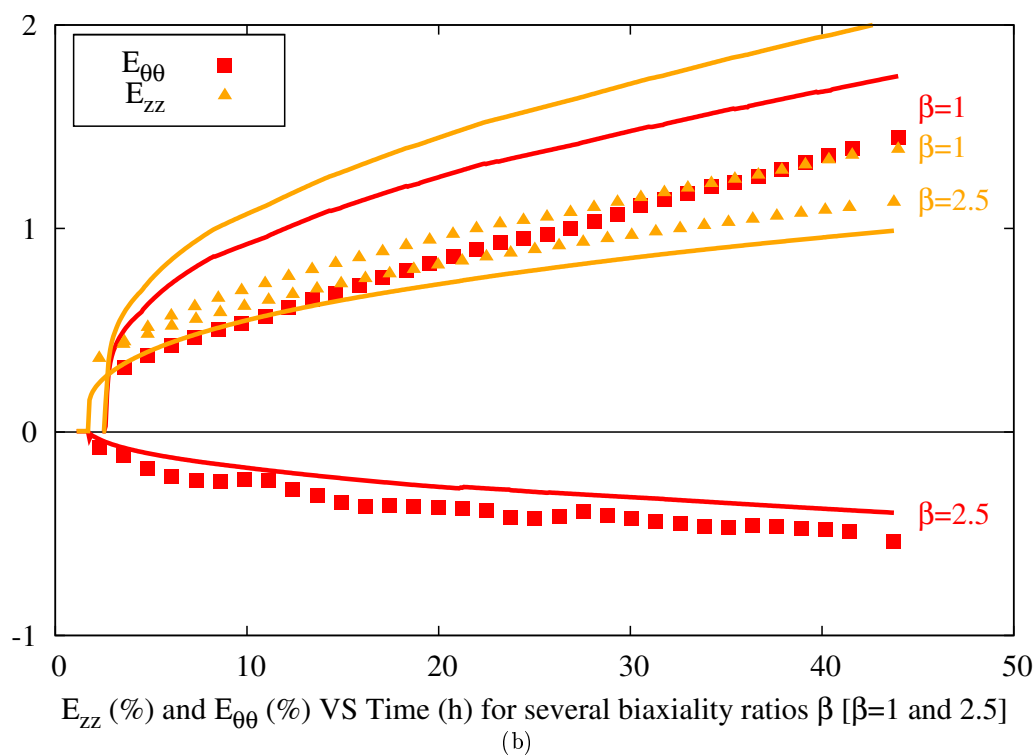
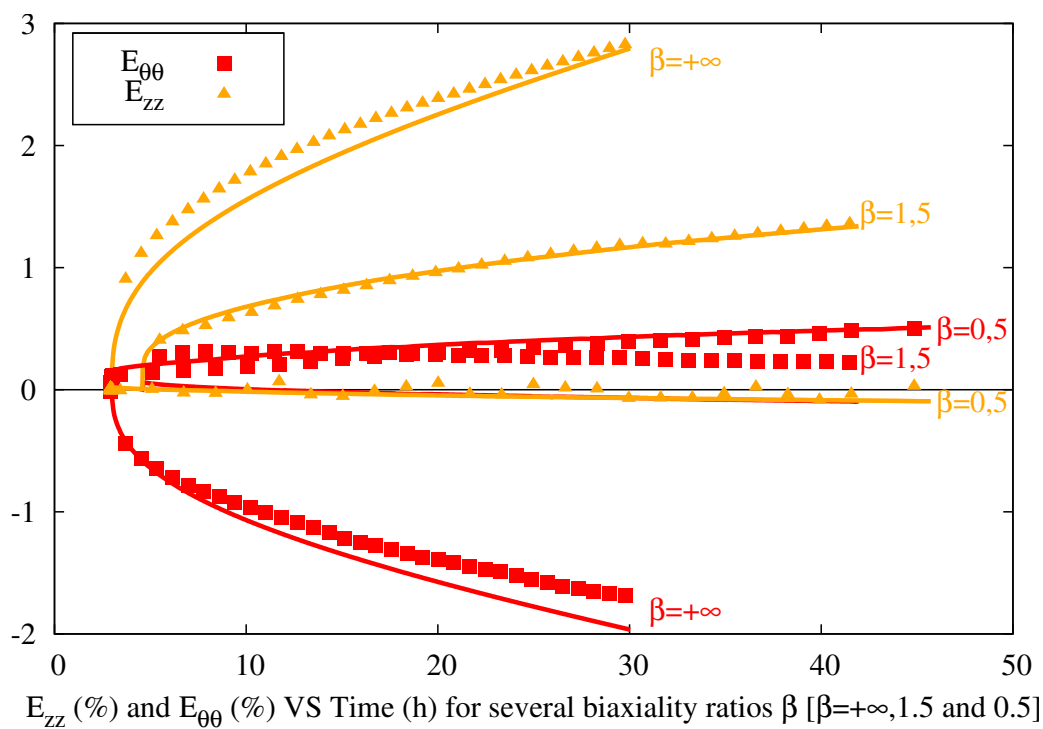


FIG. IV.21 – Confrontation modèle/expérience pour différents essais de fluage.

## IV.3.6.3 Surfaces isovitesse

Dans le but de visualiser la capacité du modèle à décrire l'anisotropie de comportement en fluage, on souhaite simuler les surfaces isovitesse en fluage stationnaire. Comme pour le modèle polycristallin présenté dans la première partie de ce chapitre, on obtient les surfaces isovitesse par une estimation dichotomique que l'on mène jusqu'à convergence sur la vitesse cible avec un critère de précision fixé à 1%. On représente sur la figure IV.22 les surfaces isovitesse simulées par le modèle à deux surfaces pour trois vitesses cibles ainsi que les vecteurs d'écoulement stationnaires obtenus expérimentalement.

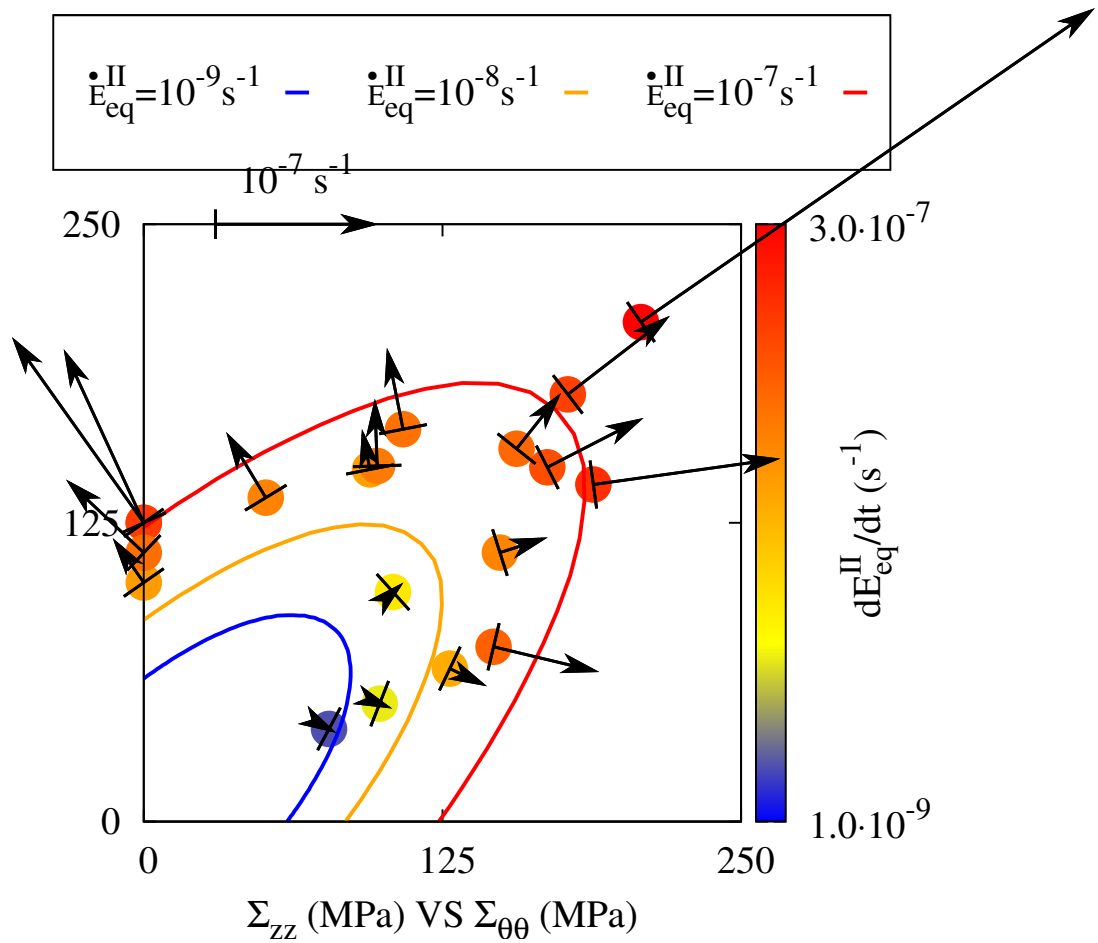


FIG. IV.22 – Simulation des surfaces isovitesse par le modèle à deux surfaces et vecteur d'écoulement stationnaire mesuré expérimentalement.

On représente sur les graphiques de la figure IV.23 les surfaces isovitesse correspondants aux mécanismes Prismatique et Non Prismatique introduits dans le modèle à deux surfaces pour trois vitesses cibles différentes. On observe que c'est le mécanisme Prismatique qui contrôle la vitesse de fluage pour l'ensemble des trajets de chargement dans le plan  $(\Sigma_{zz}, \Sigma_{\theta\theta})$  et que le mécanisme Non Prismatique est plus actif pour les

faibles vitesses de fluage. On retrouve également que l'activité plastique du mécanisme non prismatique dépend de la biaxialité  $\beta$  du chargement et que la sollicitation pour laquelle  $\beta = 1$  est la plus favorable pour le mécanisme non prismatique.

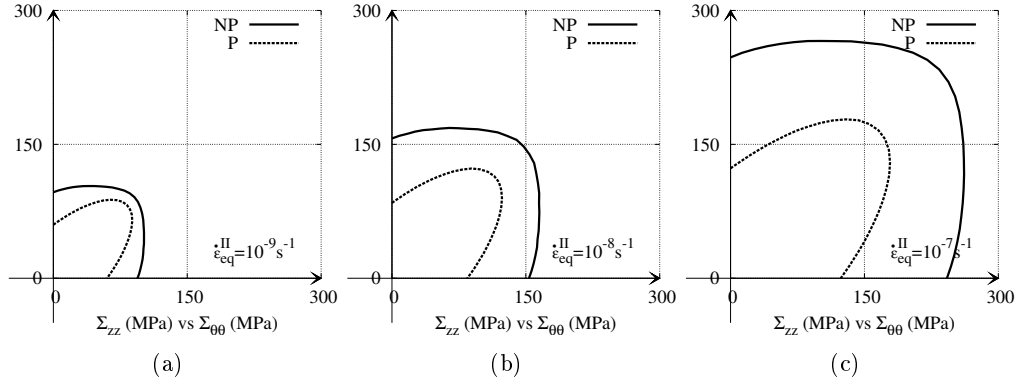


FIG. IV.23 – Surfaces isovitesse dans le plan  $(\Sigma_{zz}, \Sigma_{\theta\theta})$  associées aux mécanismes P et NP simulées par le modèle à deux surfaces à 400°C pour trois vitesses cibles (a)  $\dot{\varepsilon}_{eq}^{II} = 10^{-9} \text{s}^{-1}$ , (b)  $\dot{\varepsilon}_{eq}^{II} = 10^{-8} \text{s}^{-1}$  et (c)  $\dot{\varepsilon}_{eq}^{II} = 10^{-7} \text{s}^{-1}$ .

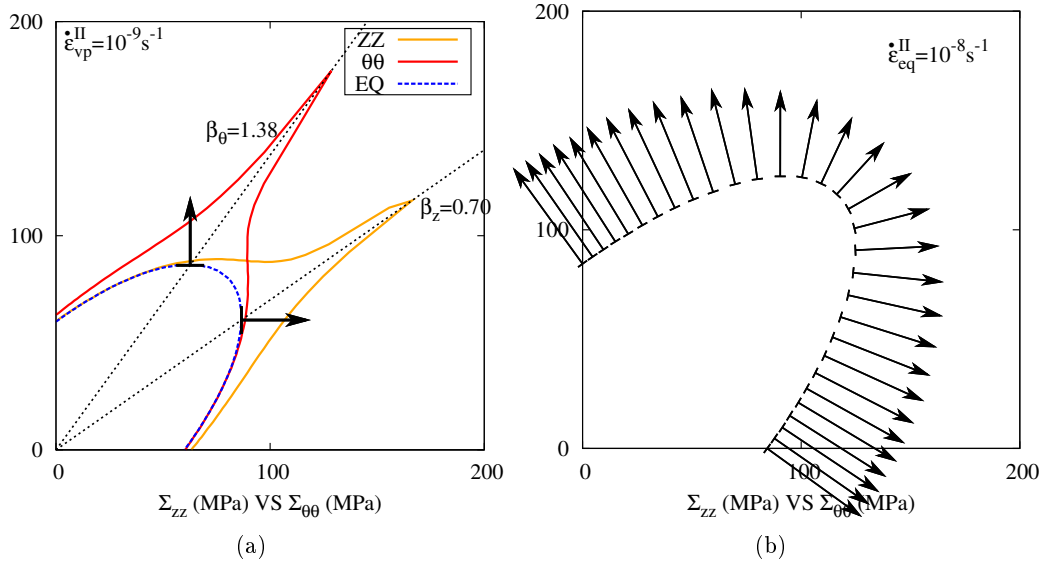


FIG. IV.24 – (a) Surfaces isovitesse équivalente, axiale et circonférentielle et (b) vecteurs d'écoulement stationnaires simulés par le modèle à 2 surfaces pour une "viscosité"  $\eta = 6,6 \cdot 10^9 \text{MPa.s}$

On peut accéder grâce au modèle à des informations supplémentaires comme par exemple les surfaces isovitesse axiale et circonférentielle, c'est-à-dire les lieux des points dans l'espace des contraintes où les vitesses de fluage stationnaires axiale et circonféren-

tielle sont constantes. On représente sur le graphique de la figure IV.24(a), les isovitesse équivalente, axiale et circonférentielle pour une vitesse cible  $\dot{\varepsilon}_{vp}^{II} = 10^{-9} \text{ s}^{-1}$ . On met alors en évidence un comportement singulier dans les directions  $\beta_\theta = 1,38$  et  $\beta_z = 0,70$  car les vitesses de fluage circonférentielle et axiale sont respectivement nulle dans ces deux directions. Nous pouvons retrouver ces deux directions par l'intermédiaire de l'isovitesse équivalente en cherchant les directions pour lesquelles la normale à la surface isovitesse est parallèle aux directions axiale et circonférentielle. Si l'on trace les vitesses de fluage circonférentielle et axiale en fonction de la biaxialité  $\beta$  du chargement (Fig. IV.25), on observe que la position des inversions de signe de l'écoulement viscoplastique dans les directions axiale ( $\beta_z$ ) et circonférentielle ( $\beta_\theta$ ) prédite par le modèle à deux surfaces est en accord avec les données expérimentales. Finalement, si on impose une sollicitation pour laquelle  $\beta_z < \beta < \beta_\theta$ , les vitesses de fluages axiale et circonférentielle sont toutes les deux positives alors que si on est en dehors de cet intervalle, les vitesses sont de signes opposés.

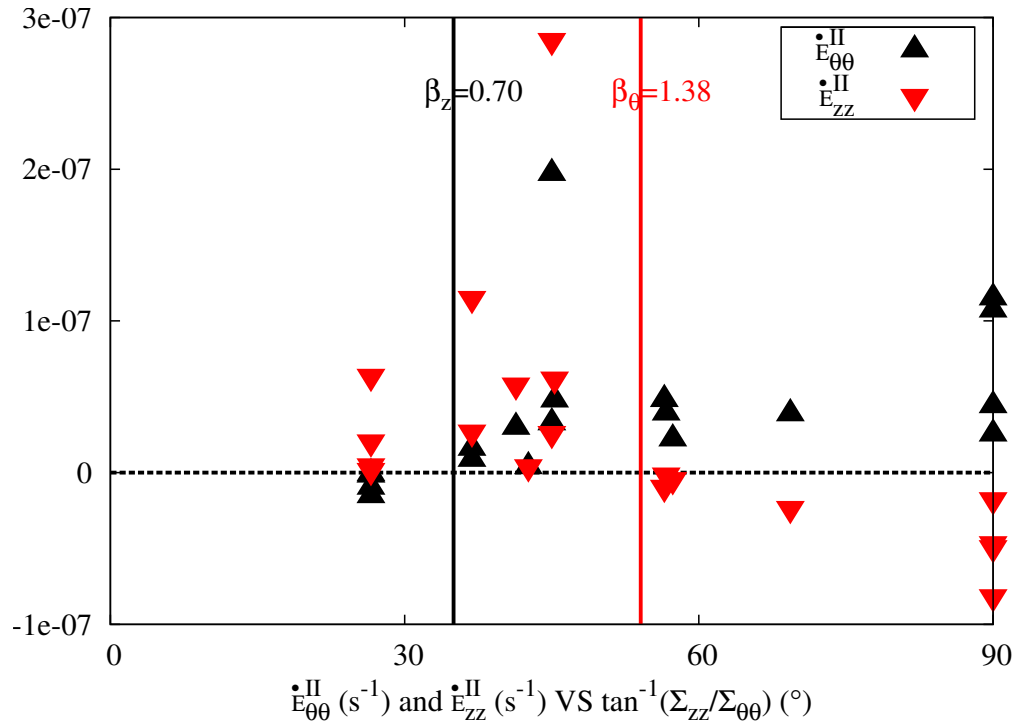


FIG. IV.25 – Inversion de signe de la vitesse de fluage stationnaire dans les directions axiale et circonférentielle respectivement pour  $\beta = \beta_z$  et  $\beta = \beta_\theta$ .

Dans ce chapitre, nous avons décrit les différentes stratégies de modélisation du comportement mécanique des alliages de zirconium.

L'anisotropie du comportement mécanique des alliages de zirconium provient de la structure hexagonale faiblement symétrique et de la texture cristallographique marquée des produits laminés. La démarche micromécanique permet de prendre en compte de façon explicite ces deux aspects dans la modélisation et confère au modèle polycristallin des propriétés intéressantes. Nous proposons une modélisation intégrant les observations réalisées en MET et l'appliquons au fluage multiaxial à 400°C du Zy-4 recristallisé. Le modèle permet de reproduire les résultats expérimentaux obtenus en fluage, pour l'ensemble des trajets de chargement. Des résultats préliminaires indiquent que la manière dont le glissement dévié a été introduit dans le modèle affecte peu les caractéristiques obtenus en fluage.

Sur la base des résultats obtenus par Geyer avec le modèle polycristallin à 20°C, nous montrons qu'un critère d'écoulement mixte permet de mieux décrire les observations numériques réalisées sur les surfaces de charge simulées par le modèle polycristallin. Pour les alliages recristallisés, proposons un modèle à deux surfaces (Prismatique et Non Prismatique) pour décrire l'interaction des systèmes de glissement secondaire avec les systèmes prismatiques. Ce modèle multimécanisme basé sur un critère d'écoulement mixte est appliqué au comportement du Zy-4 à 20°C et à 400°C. Il permet de décrire convenablement les données expérimentales obtenues par Robinet et Geyer à 20°C et par Grosjean et Rautenberg à 400°C.

L'intérêt de cette approche macroscopique multimécanisme est de pouvoir introduire facilement un autre mécanisme de déformation comme, par exemple, le glissement sur les plans de base pour les alliages de zirconium irradiés [Onimus 03, Fandeur 01].

# Chapitre V

---

## Vers une modélisation micromécanique du fluage sous irradiation

---

Les modèles de comportement développés jusqu'à présent permettent de décrire le comportement hors irradiation des alliages de zirconium recristallisés. Nous souhaitons intégrer les effets de l'environnement dans la modélisation du comportement mécanique et plus particulièrement les effets de l'irradiation neutronique. Nous proposons dans ce chapitre une revue bibliographique des effets de l'irradiation sur le comportement mécanique des alliages de zirconium en tentant de dégager les mécanismes responsables de la déformation sous irradiation.

Sous l'impact des chocs ballistiques entre les neutrons et les atomes, la microstructure d'un alliage de zirconium subit des transformations au cours de son séjour en réacteur, et les propriétés mécaniques du matériau s'en trouvent largement modifiées. Dans une démarche de modélisation micromécanique, il est nécessaire de connaître les dommages d'irradiation que subissent ces alliages en service ainsi que leurs évolutions si l'on souhaite accéder aux modifications en termes de propriétés macroscopiques. L'objectif de ce chapitre est de comprendre l'origine des dommages imputables à l'irradiation dans les alliages de zirconium au regard des résultats publiés dans la littérature ouverte, et comment ils interagissent avec les mécanismes de déformation. Nous proposons à la fin de ce chapitre une démarche de modélisation intégrant les mécanismes supposés de déformation sous irradiation décrits au préalable.

## V.1 Effets de l'irradiation sur la microstructure

Sous l'impact d'une collision élastique entre une particule incidente et un atome cible (Primary Knock-on Atom, PKA), celui-ci peut-être éjecté de son site cristallin et laisser derrière lui un défaut ponctuel (DP) de type lacunaire, tandis que l'atome éjecté se place en position interstitielle (cf Fig. V.1). La paire de défauts ainsi formée est une paire de Frenkel. Si l'atome expulsé possède à son tour une énergie supérieure à l'énergie seuil de déplacement du réseau,  $E_d$ , alors il y a mise en place d'une cascade de déplacements.

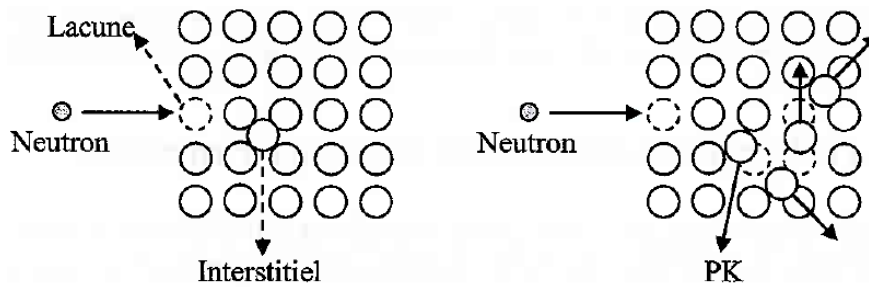


FIG. V.1 – Création d'une paire de Frenkel et développement d'une cascade de déplacement [Ribis 07].

### V.1.1 Cascade de déplacements

Si l'on considère le cas d'une collision élastique entre une particule d'énergie incidente  $E_0$  et une particule cible au repos (le noyau d'un atome), on suppose qu'il y a conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie lors du choc. Ces équations de conservation permettent de remonter à l'énergie maximale transmise et à l'énergie moyenne transmise  $\bar{T}$  qui vaut la moitié de l'énergie maximale. Si l'on considère une irradiation avec un faisceau d'électrons de 100keV, l'énergie moyenne transmise à un atome de zirconium vaut 1.3eV dans le cadre d'une approximation relativiste, alors qu'elle vaut 22eV avec un faisceau de même énergie mais constitué de neutrons. La très faible masse de l'électron par rapport à celle d'un atome de zirconium empêche donc l'accumulation de dommage d'irradiation dans le matériau cible. Toutefois, l'irradiation électronique peut être utilisée afin d'évaluer l'énergie seuil de déplacement. Même si rigoureusement, l'énergie seuil de déplacement d'un atome hors de son site cristallin dépend de la direction, la plupart des auteurs considèrent une énergie seuil de déplacement isotrope et prennent comme valeur  $E_d = 25\text{eV}$  pour les métaux.

Le comportement des cascades de déplacements ne peut être étudié que par le biais de simulation numérique [Kapinos 91, Phythian 88, Bacon 88]. Le logiciel SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter) disponible en ligne sur le site [www.srim.org](http://www.srim.org) permet

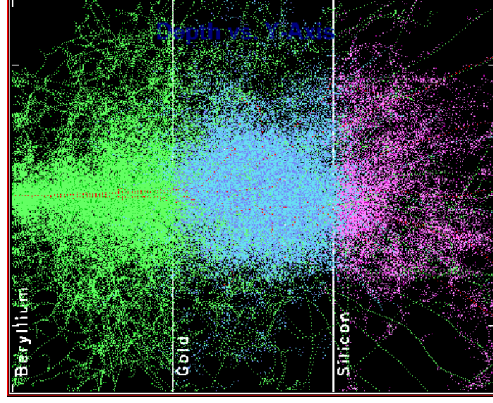


FIG. V.2 – Simulation d'une cascade de déplacement par le logiciel SRIM [Source : [www.srim.org](http://www.srim.org)].

de visualiser, à l'aide d'outil de simulation de type Monte-Carlo, les cascades de déplacements décrites précédemment. Le lecteur soucieux d'une utilisation approfondie de ce logiciel pourra se référer à l'article [Simeone 97]. Sur la figure V.2, on peut observer le résultat obtenu par ce logiciel pour une irradiation d'un matériau multicouche par un faisceau d'ions lourds d'uranium d'énergie 100keV.

### V.1.2 Production des défauts ponctuels

Dans le cas où la particule incidente possède suffisamment d'énergie suite à la création d'un PKA, celle-ci peut produire à nouveau un PKA et donner naissance à une nouvelle cascade de déplacements. Le nombre de cascades qu'est capable de développer un faisceau de particules est directement proportionnel au flux de particules et aux nombres d'atomes cibles par unité de volume. On peut écrire le taux de création de PKA sous la forme suivante :

$$G_p = N \cdot \sigma_{el} \cdot \phi \quad (V.1)$$

où  $N = \frac{\rho N_A}{A}$  est le nombre d'atomes cibles par unité de volume avec  $\rho$  la masse volumique,  $N_A$  le nombre d'Avogadro et  $A$  la masse atomique,  $\sigma_{el}$  est la section efficace d'interaction élastique et  $\phi$  est le flux de particules incidentes.

Chaque choc primaire induit une cascade de déplacements et on peut évaluer le nombre d'atomes déplacés dans chaque cascade par une approche issue de la théorie NRT (Norgett, Robinson et Torrens) [Norgett 75] :

$$n_d = 0,8 \cdot \frac{\bar{T}}{2E_d} \quad (V.2)$$

où  $\bar{T}$  est l'énergie moyenne transmise,  $E_d$  est l'énergie seuil de déplacement et où 0,8 est un facteur correctif qui prend en compte les dissymétries de fin de branches (faible



probabilité qu'un atome ayant une énergie légèrement supérieure à  $2E_d$  déplace deux atomes).

Le taux de production de défauts ponctuels peut alors s'écrire comme le ratio entre le nombre total d'atomes déplacés et le nombre total d'atomes. Le taux de création s'exprime en déplacement par atome et par unité de temps.

$$K = G_p \frac{n_d}{N} \quad (\text{V.3})$$

Si l'on examine le cas d'un gainage combustible en alliage de zirconium [Lemaignan 04] où  $A = 92$ ,  $\sigma_{el} = 3.10^{-28} m^2$  et  $\rho = 6,5 g/cm^3$  et en considérant un flux rapide ( $E > 1 \text{ MeV}$ )  $\phi = 5.10^3 n/cm^2/s$ , on trouve un taux de création de primaire  $G_p = 6.10^{12} cm^{-3}s^{-1}$  ayant pour énergie moyenne  $\bar{T} = 22 \text{ keV}$  induisant 350 déplacements dans chaque cascade en moyenne, soit un taux de production de DP de 1,5dpa/an.

#### V.1.2.1 Recombinaison des défauts

A chaque création d'une paire de Frenkel, l'énergie interne du matériau augmente au point de rendre le matériau thermodynamiquement hors d'équilibre. Plusieurs mécanismes sont activés afin de limiter la concentration en DP. En quelques picosecondes, des calculs de dynamique moléculaire indiquent que près de 90% des DP générés dans les cascades de déplacement sont recombinés [Wooding 98]. Ce processus de recombinaison quasi instantanée opère par relaxation élastique de la matrice et permet de diminuer l'énergie interne stockée dans le matériau.

Les temps caractéristiques d'évolution d'une cascade de déplacements dans un métal sont consignés dans le tableau V.1. Ils nous fournissent des renseignements intéressants quant à la manière de prendre en compte les effets de l'irradiation dans une problématique de modélisation de la déformation sous irradiation. En effet, comme la phase d'effondrement d'une cascade est très rapide devant les temps caractéristiques de diffusion des DP, ces mécanismes de diffusion contrôlent la vitesse de déformation sous irradiation, il conviendra de considérer uniquement l'état effondré et de ne prendre en compte que les DP restants après cet effondrement très efficace.

Les DP peuvent également se recombiner au gré de leur chemin de diffusion. Lorsqu'une lacune et un interstitiel se trouvent dans un même volume de l'ordre de  $100b^3$ , il y a annihilation de ces deux défauts sans déformation associée. Ce volume dit de recombinaison élastique est très anisotrope, il s'étend plus largement dans les directions principales du cristal.

#### V.1.3 Evolutions microstructurales

Les DP produits sous irradiation vont avoir un impact majeur sur le comportement mécanique de l'alliage. Plusieurs évolutions microstructurales des alliages de zirconium sont relatées dans la littérature :

| Phénomène                              | Temps caractéristique |
|--|-----------------------|
| Création d'une cascade                 | $10^{-13}s$           |
| Effondrement de la cascade             | $10^{-12}s$           |
| Diffusion interstitielle               | $10^{-6}s$            |
| Diffusion lacunaire                    | $1s$                  |
| Evolution microstructurale en réacteur | $10^6s$               |

TAB. V.1 – Temps caractéristiques d'évolution d'une cascade et de diffusion (d'après [Hugot 99]).

- L'agglomération planaire de DP va provoquer la germination puis la croissance de boucles de dislocations pouvant être de type lacunaire et interstitielle.
- L'irradiation a pour effet de déplacer les équilibres thermodynamiques. Tous les phénomènes pilotés par des mécanismes de diffusion sont accélérés par l'irradiation du fait d'un transport atomique plus efficace si bien que l'on peut voir apparaître des nouvelles phases (précipitation de  $\beta - Nb$  dans le M5<sup>®</sup>) ou bien au contraire en voir d'autres disparaître (Amorphisation et dissolution des phases de Laves dans les Zircaloy).
- Enfin, l'agglomération tridimensionnelle de lacunes entre elles est à l'origine de l'apparition de cavités dans le matériau (les alliages de Zr sont cependant très résistants à ce phénomène).

Tous ces défauts microstructuraux induits par l'irradiation sont schématisés sur la figure V.3.

### V.1.3.1 Les boucles de dislocations

Lorsque des DP de même signe s'agglomèrent entre eux sur un même plan cristallographique, il y a formation d'une boucle de dislocations. La force motrice de cette formation d'un cluster de DP est également la diminution de l'énergie interne du matériau. En effet, on peut montrer par exemple qu'il est énergétiquement plus favorable de former une bilacune plutôt que deux lacunes séparées. Comme cela a été souligné précédemment, une cascade de déplacements ne subsiste que très peu de temps dans le matériau (quelques picosecondes). Suite à l'effondrement de la cascade, il ne reste alors plus que quelques DP libres de migrer ainsi que quelques petits amas contenant deux ou trois DP. Ce sont ces petits amas qui vont servir de site de germination pour les boucles de dislocations. On peut observer ces boucles en Microscopie Electronique en Transmission (cf Fig. V.4(a)). La microstructure des alliages de zirconium irradiés est essentiellement constituée de petites boucles de dislocations  $\langle a \rangle$  d'environ 8nm de diamètre. La densité de boucles est de l'ordre de  $2 \text{ à } 5.10^{22} \text{m}^{-3}$  [Northwood 77].

Contrairement au cas des métaux cubiques, les microstructures d'irradiation varient d'un métal hexagonal à l'autre. Afin de tenter d'éclaircir ce point, Griffiths a mené une

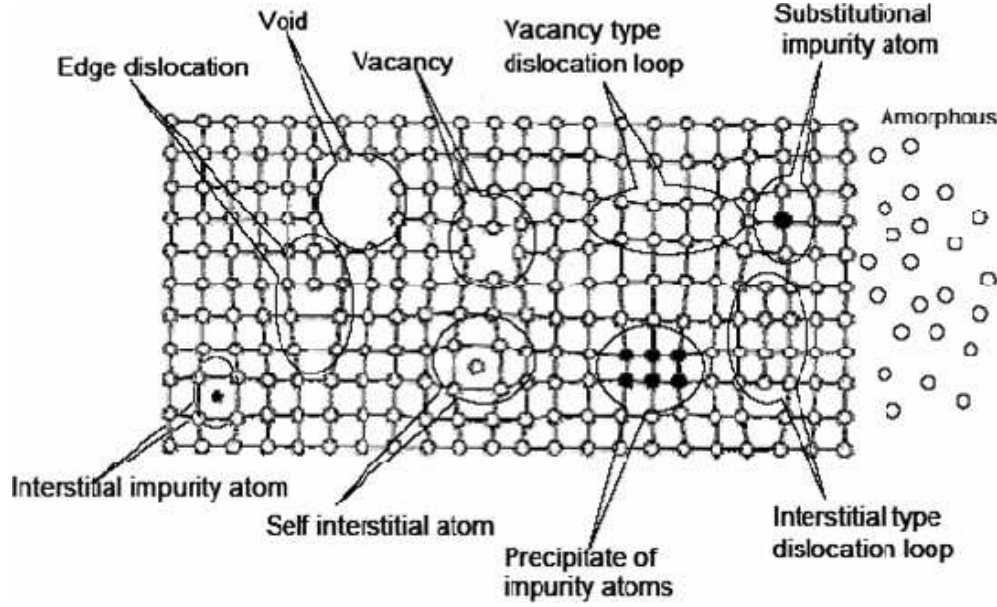


FIG. V.3 – Evolution microstructurale d'un alliage soumis à une irradiation [Mukherjee 08].

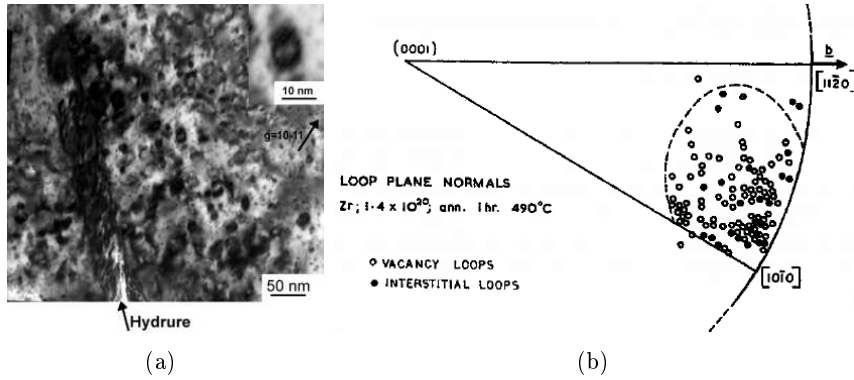


FIG. V.4 – (a) Observation de la microstructure d'irradiation obtenue sur du Zy4 à une fluence  $0,4 \cdot 10^{25} \text{ n/m}^2$  et une température de 350°C [Onimus 03] et (b) Distribution des normales aux boucles de dislocations dans le triangle standard [Jostsons 77].

campagne expérimentale d'irradiation aux électrons de plusieurs métaux hexagonaux [Griffiths 93]. Ainsi, il montre que le plan d'habitat des boucles de dislocations est gouverné par le rapport  $c/a$  et par l'énergie de faute d'empilement.

Le "round-robin" organisé par Northwood en 1979 [Northwood 79] a permis de mettre fin aux désaccords qui demeuraient sur la nature exacte des dommages d'ir-

radiation dans les alliages de zirconium. A l'époque, il n'y avait pas de consensus sur ces dommages d'irradiation. On ne connaissait pas la nature des défauts, ni leur taille, leur densité et leur vecteur de Burgers.

Afin de pouvoir comparer leurs résultats, les laboratoires impliqués dans ce projet se sont fixés des conditions opératoires : une dose d'irradiation allant jusqu'à  $\phi_t = 10^{25} \text{ n/m}^2$ , deux matériaux d'étude (le Zircaloy-2 et le zirconium crystal bar) et des températures d'irradiation allant de  $250^\circ\text{C}$  à  $400^\circ\text{C}$ . Tous les laboratoires ont trouvé *indépendamment* que les dommages d'irradiation étaient, pour cette dose d'irradiation et cette gamme de température, exclusivement constitués de boucles de dislocations  $\frac{1}{3} < 11\bar{2}0 >$ , à la fois de type lacunaire et de type interstitielle, reposant sur des plans proches des plans prismatiques. Notons qu'aucune boucle à composante **c** n'a pu être mise en évidence. La distribution des normales aux boucles de dislocations dans le triangle standard permet de visualiser quantitativement la dispersion des plans d'habitats autour des plans prismatiques (cf Fig. V.4(b)).

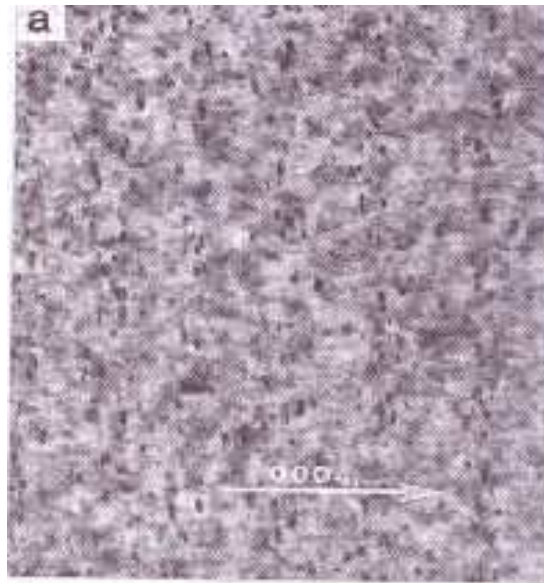
### V.1.3.2 Déplacement des équilibres thermodynamiques

Comme les processus diffusionnels résultent de sauts atomiques, si on augmente la concentration en lacunes, on augmente la fréquence de saut et donc la vitesse de diffusion. Tous les mécanismes contrôlés par la diffusion seront alors accélérés par l'irradiation. On peut citer, à titre d'exemple, la précipitation induite par l'irradiation dans les alliages de zirconium alliés au niobium. En effet, dans ce type d'alliage, on observe après irradiation des précipités fins de  $\beta$ -Nb riches en niobium. Cette précipitation est aussi bien rapportée dans les alliages Zr-1Nb [Shishov 96, Gilbon 00] (cf Fig. V.5(a)) que dans le Zr-2.5%Nb [Griffiths 96].

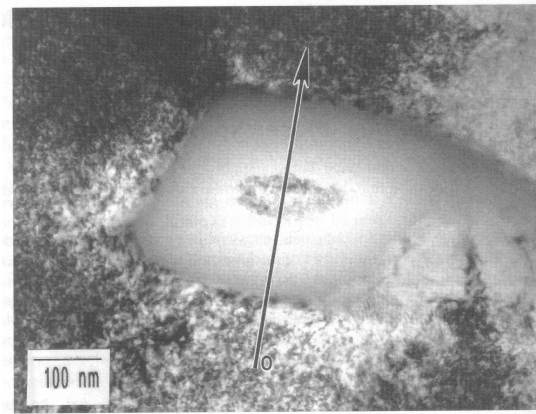
Un autre exemple est l'amorphisation progressive sous irradiation des particules de seconde phase (cf Fig. V.5(b)) accompagnée de la remise en solution du fer dans les Zircaloy. Ce phénomène est à l'origine de la stabilisation des dislocations à composantes **c** et par voie de conséquence de l'accélération de croissance observée à forte fluence pour cette famille d'alliages [de Carlan 96].

## V.2 Déformation sous irradiation : Mécanismes & interprétations

L'objectif de cette partie est de présenter les effets de l'irradiation sur les propriétés mécaniques des alliages de zirconium. Après avoir décrit les mécanismes de déformation probablement responsables de la déformation induite par l'irradiation, nous tâcherons d'expliquer les constats expérimentaux des effets de l'irradiation à la lumière de ces mécanismes. Pour terminer, un état de l'art des modèles de fluage d'irradiation publiés dans la littérature ouverte est présenté et une démarche de modélisation est proposée.



(a) Précipitation de  $\beta - Nb$  induit par l'irradiation dans le M5<sup>®</sup> [Gilbon 00].



(b) Transformation amorphe d'un précipité inter-métallique sous irradiation [Griffiths 96].

FIG. V.5 – Exemples de déplacement d'équilibres thermodynamiques sous irradiation.

Avant les années 1960, les phénomènes de déformation sous flux étaient pratiquement inconnus. C'est seulement à partir de cette décennie que la communauté scientifique s'est intéressée à cette problématique. Les objectifs des premiers programmes de recherche étaient de mieux connaître l'évolution microstructurale des alliages sous irradiation et de déterminer les causes des déformations observées sous flux.

L'irradiation des alliages de zirconium en réacteur conduit à une sursaturation de la matrice en DP. La communauté scientifique s'accorde à dire que les mécanismes d'élimination des DP, produits en grand nombre lors d'une irradiation, expliquent l'évolution du comportement d'un alliage soumis à un flux neutronique [Piercy 68, Garner 88, Fidleris 88] mais les mécanismes d'élimination restent flous [Holt 08] étant donné les difficultés expérimentales évoquées plus tôt.

La mobilité des DP étant pilotée par des mécanismes diffusionnels, elle dépend fortement de la température. Moyennant une mobilité suffisante, les DP peuvent migrer sur de grandes distances et peuvent être annihilés par un DP de signe opposé, auquel cas aucune déformation n'est enregistrée, ou bien absorbées par un puits (principalement les dislocations ou les joints de grain). Dans ce dernier cas, une déformation est enregistrée consécutivement au mouvement de la dislocation ayant absorbé le DP. Plus précisément, si pour une raison donnée, les puits de dislocations (on appelle puits un défaut microstructural capable d'absorber des DP) existants au sein de la microstructure reçoivent un flux net de DP, on enregistrera une déformation induite par l'irradiation.

Divers types de déformations sont observés pour les métaux exposés à un flux neutronique :

- Sous l'effet de la température et de la contrainte, on observe une déformation de **fluage thermique** régie par le glissement des dislocations suivant les plans de glissement faciles.
- Sous l'action du flux, on observe une déformation des alliages non cubiques et fortement texturés induite par l'élimination anisotrope des DP sur les puits : c'est le phénomène de **croissance**.
- Sous l'action combinée d'une contrainte et d'un flux, on enregistre une déformation de la structure qui peut être trois fois plus rapide que la déformation enregistrée hors flux pour le même niveau de contrainte et la même température. L'élimination des DP à l'origine de la déformation de croissance des alliages de zirconium est modifiée par l'application d'une contrainte. C'est le phénomène de **fluage d'irradiation**.
- L'élimination non compensée des lacunes en sursaturation sur les cavités formées dans la matrice est à l'origine d'un phénomène qui n'est pas observé dans les alliages de zirconium mais dans les alliages cubiques comme les aciers par exemple : c'est le **gonflement**.

### V.2.1 Puits de défauts ponctuels

Le biais d'un puits est un concept central dans la théorie de la déformation induite par l'irradiation [Woo 88]. Il mesure la quantité relative de DP qu'un puits absorbe. Le fait que les différents types de puits (dislocations, boucles de dislocations, joints de grains, surfaces libres, précipités...) existants au sein de la microstructure possèdent des biais différents résulte dans un déséquilibre des flux de DP vers ces puits. La non compensation des flux induit une évolution microstructurale importante de l'alliage et se manifeste à l'échelle macroscopique par une déformation plastique.

Chaque puits possède un biais intrinsèque qui ne dépend pas des conditions extérieures, il peut être faible auquel cas on parle de puits neutre ou bien élevé, on parle alors de puits polarisé ou biaisé. Cette caractéristique intrinsèque aux puits permet de comprendre l'origine de la déformation de croissance observée en réacteur. L'irradiation d'un polycristal de zirconium non contraint conduit à la production de DP en grand nombre qui sont éliminés de façon biaisée sur les puits présents dans la microstructure via des mécanismes diffusionnels. Ces mécanismes microscopiques, associés à une texture marquée du produit, conduisent à la déformation de croissance des assemblages combustibles observée en service.

L'article de Smoluchowski publié en 1917 [Smoluchowski 17] a permis de décrire pour la première fois la cinétique d'évolution d'un système chimique. Le développement de cette théorie prometteuse s'est poursuivie avec des auteurs comme Onsager [Onsager 38] et Debye [Debye 42] qui généralise l'approche de Smoluchowski à d'autres cas ou encore Waite [Waite 57] qui introduit la notion de probabilité de paire. L'idée de la théorie que Woo a développé sur ce sujet [Woo 88] est de faire l'analogie entre l'évolution d'une réaction chimique et l'évolution d'une population de DP migrant vers des puits. Les réactions qui se produisent entre les DP et l'annihilation des DP sur les puits peuvent être représentés par une réaction bimoléculaire du type V.4.



Dans cette équation, un des réactants au moins peut diffuser et on considère que la concentration en produit de réaction  $C$  n'influence pas la réaction V.4. Partant d'un système de réactants aléatoirement distribués, on considère une énergie d'interaction  $U(r)$  entre  $A$  et  $B$  et deux tenseurs de diffusion  $D_A$  et  $D_B$ . On peut alors montrer [Gosele 76] que l'évolution des concentrations  $C_A$  et  $C_B$  moyennées dans l'espace est complètement gouvernée par un coefficient de réaction  $\alpha(t)$ .

$$\dot{C}_A = \dot{C}_B = -\bar{D}\alpha(t)C_AC_B \quad (\text{V.5})$$

avec :

$$D = D_A + D_B \quad \text{et} \quad \bar{D} = (D_x D_y D_z)^{1/3} \quad (\text{V.6})$$

et :

$$\alpha(t) = \frac{1}{\Omega} \int \left( \nabla \phi + \frac{1}{k_B T} \nabla U \right) dS \quad (\text{V.7})$$

où  $\Omega$  est le volume atomique et la fonction  $\phi$  est reliée à la densité de probabilité de paire.

Afin d'estimer les flux de DP vers les puits de la microstructure, l'idée est d'introduire un coefficient de réaction  $\alpha$  entre un DP et un puits permettant de définir le flux de DP vers le puits  $s$  considéré. Les courants de DP vers le puits  $s$  s'obtiennent par l'intermédiaire des relations V.8.

$$\begin{cases} \phi_i^s &= \alpha_i^s \bar{D}_i C_i \\ \phi_v^s &= \alpha_v^s \bar{D}_v C_v \end{cases} \quad (\text{V.8})$$

Le puits  $s$  voit alors un flux net de DP  $\phi_s$  tel que :

$$\phi_s = \phi_i^s - \phi_v^s \quad (\text{V.9})$$

Les concentrations en DP peuvent être évaluées par les équations de conservation de la matière et le résultat montre que :

$$\phi_s = \frac{K \alpha_i^s}{\sum_s \rho^s \alpha_v^s} (\beta_s - \bar{\beta}) \quad (\text{V.10})$$

où  $\beta_s$  est le biais du puits  $s$ ,  $\bar{\beta}$  est le biais moyen de la microstructure,  $K$  est le taux de création de DP et  $\rho^s$ , la densité de puits  $s$ .

$$\begin{cases} \beta_s &= \frac{\alpha_i^s - \alpha_v^s}{\sum_s \rho^s \alpha_i^s \beta_s} \\ \bar{\beta} &= \frac{\sum_s \rho^s \alpha_i^s \beta_s}{\sum_s \rho^s \alpha_i^s} \end{cases} \quad (\text{V.11})$$

Les forces du puits  $s$  associées à ses coefficients de réaction s'écrivent alors sous la forme suivante :

$$\begin{cases} k_{i,s}^2 &= \beta_i^s \rho^s \\ k_{v,s}^2 &= \beta_v^s \rho^s \end{cases} \quad (\text{V.12})$$

où  $\rho^s$  est la densité de puits  $s$  présente dans la microstructure,  $\beta_i^s$  est le biais du puits  $s$  envers les interstitiels et  $\beta_v^s$  est le biais du puits  $s$  envers les lacunes. Souvent, on fixe  $\beta_v^s = 1$  et on ajuste la valeur de  $\beta_i^s$  afin d'approcher au mieux les données expérimentales. Pour les dislocations, les auteurs prennent souvent les valeurs de  $\beta_i - \beta_v \sim 20\%$  avec  $\beta_v$  fixé à 1.

Plusieurs grandeurs sont à l'origine du biais d'un puits. Nous souhaitons à présent comprendre quelles sont ces grandeurs et de quelle manière elles influencent le biais des puits d'une microstructure.



### V.2.2 Différence de volume de relaxation

Un défaut lacunaire possède un volume de relaxation négatif et est en valeur absolue plus petit que le volume de relaxation d'un défaut interstitiel. Plongé dans un champ de contrainte à longue distance d'une dislocation (champ en  $1/r$ ), l'interaction élastique entre un DP et une dislocation ne sera pas de même amplitude suivant le type de DP [Cottrell 48, Schwarz 75]. Cette différence de volume de relaxation induira une constante de réaction différente entre le DP et les puits et donc un biais sur les puits de la microstructure. La contribution  $\beta_e$  de cette différence de volume de relaxation au biais total d'un puits n'excède pas 20% [Woo 88].

### V.2.3 Différence d'Anisotropie de Diffusion (DAD)

A l'origine, la théorie de déformation sous irradiation fut formulée pour les métaux cubiques dans lesquels la diffusion peut être raisonnablement considérée comme isotrope. Les concepts développés pour les métaux cubiques furent donc appliqués aux cas des métaux hexagonaux comme les alliages de zirconium, mais on s'aperçut assez rapidement que la transposition des résultats ne pouvaient se faire de manière directe. Etant donnée l'anisotropie du réseau cristallographique, on peut bien entendu s'attendre à une diffusion anisotrope dans ce type de cristal et la prise en compte des effets de cette anisotropie pourrait résoudre un certain nombre de problèmes. Il est maintenant acquis que cette anisotropie cristallographique influence le comportement du matériau sous irradiation au moins par deux mécanismes distincts : à l'échelle du polycristal via les interactions intergranulaires [Adams 80, Woo 85] et à l'échelle intracristalline par le biais de l'anisotropie de diffusion [Woo 88].

La diffusion anisotrope d'un DP dans un réseau hexagonal peut être directement reliée à sa structure cristallographique. La caractéristique principale de l'édifice cristallin hexagonal est que la distance  $c$  entre deux plans de base est plus grande que la distance séparant deux atomes plus proches voisins dans le plan de base d'un rapport environ égal à 1.633. Si l'on considère un mécanisme de diffusion interstitiel, le col d'énergie à franchir pour réaliser un saut atomique sera alors plus faible suivant l'axe  $c$  que dans le plan de base, alors que ce sera le contraire si l'on considère un mécanisme de diffusion lacunaire. Autrement dit, la nature différente des DP implique une différence d'anisotropie de diffusion entre lacunes et interstitiels. Les lacunes diffusent très lentement et possèdent une anisotropie de diffusion très faible par rapport aux interstitiels. Bien souvent on considère une isotropie de diffusion lacunaire et une forte anisotropie de diffusion interstitielle ( $\frac{D_c}{D_a} \sim 3$  à 5).

La DAD entre les lacunes et les autointerstitiels (SIA) dans les métaux hexagonaux est à l'origine d'un des mécanismes de déformation sous flux les plus importants [Woo 84, Woo 88]. Une fois générés sous irradiation, les DP peuvent se recombiner ou bien diffuser sur de longues distances et se faire absorber sur des puits comme par exemple les dislocations, les boucles ou encore les joints de grain. Il résulte alors de cette DAD une

différence de taux d'absorption entre les lacunes et les SIA, ce qui est équivalent à dire que la DAD induit un biais sur les puits de la microstructure. L'absorption d'un flux net de DP par les dislocations de la microstructure entraîne leur montée, ce qui induit une cinétique de déformation plus rapide. Selon Duffin [Duffin 72], dans les gammes de contrainte et de température dans lesquelles le fluage d'irradiation s'exprime, la cinétique de déformation est pilotée par la montée mais la déformation reste selon lui contrôlée par le glissement des dislocations ce qui serait en faveur d'un mécanisme de montée plus glissement (Climb Plus Glide).

#### V.2.4 Influence de la contrainte sur le biais d'un puits

L'application d'une contrainte extérieure sur un polycristal va influencer sur la constante de réaction entre un DP et un puits, et donc sur le biais des puits présents au sein de la microstructure.

##### V.2.4.1 Cas des dislocations

Si l'on prend le cas d'une dislocation, c'est l'orientation de la contrainte par rapport au vecteur de Burgers de la dislocation considérée qui va jouer un rôle de premier plan sur la modification du biais associé. En effet, plusieurs auteurs ont montré [Heald 76, Bullough 75b] que si le vecteur de Burgers d'une dislocation coin est orienté parallèlement à la contrainte appliquée, il en résulte un flux d'interstitiels plus important, alors que dans le cas d'une contrainte appliquée perpendiculaire au vecteur de Burgers, c'est le flux de lacunes qui devient plus important. Une manière d'interpréter et de synthétiser ces résultats en terme de biais est d'écrire les équations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{Si } \underline{\sigma} \parallel \underline{b}^s & \text{alors } \alpha_i^s > \alpha_v^s \\ \text{Si } \underline{\sigma} \perp \underline{b}^s & \text{alors } \alpha_v^s > \alpha_i^s \end{array} \right. \quad (\text{V.13})$$

##### V.2.4.2 Cas des joints de grains

Même si dans la majorité des cas, on considérera que les dislocations constituent les puits dominants de la microstructure, on peut envisager le même phénomène d'absorption préférentielle de DP pour les joints de grains induits par la contrainte. Les joints de grains dont la normale est orientée parallèlement à la contrainte appliquée absorbe plus d'interstitiels que de lacunes, et ceux dont la normale est orientée perpendiculairement à la contrainte appliquée absorbe plus de lacunes. La conséquence est une déformation dans le sens de la contrainte appliquée. Ce mécanisme de déformation est analogue au mécanisme proposé par Nabarro et Herring qui permet de décrire les phénomènes de fluage haute température. Dans cette configuration, les joints de grains constituent les puits dominants de la microstructure et pilotent la déformation de fluage.

### V.2.5 Concentration des défauts ponctuels

L'irradiation provoque une augmentation importante des concentrations en DP et donc de l'énergie interne du matériau. Pour diminuer celle-ci, le matériau va chercher à diminuer ces concentrations pour se rapprocher de sa configuration d'équilibre. Pour cela, il a plusieurs manières d'y parvenir : soit un DP au gré de son trajet de diffusion intercepte le volume de recombinaison d'un DP de signe opposé, auquel cas il y a annihilation des deux défauts sans déformation associée, soit les DP se condensent sur les puits de la microstructure.

### V.2.6 Théorie cinétique

Introduites pour la première fois en 1968 par Sizmann [Sizmann 78], les équations de cinétiques d'évolution des DP permettent d'évaluer le profil de concentration moyenne des DP dans la matrice. Il s'agit là de simples équations de conservation de la matière qui peuvent s'écrire de la manière suivante :

$$\begin{cases} \frac{dC_v}{dt} = K - \omega C_i C_v - \left( \sum_{s=1}^N k_{v,s}^2 \right) \bar{D}_v C_v \\ \frac{dC_i}{dt} = K - \omega C_i C_v - \left( \sum_{s=1}^N k_{i,s}^2 \right) \bar{D}_i C_i \end{cases} \quad (\text{V.14})$$

Dans les équations V.14,  $C_X$  est la concentration en lacunes ( $X = v$ ) ou en interstitiels ( $X = i$ ),  $\bar{D}_X$  est le coefficient de diffusion moyen de  $X$ ,  $K$  est le taux de production de DP et  $N$  est le nombre de types de puits dans la microstructure. On retrouve dans ces expressions  $k_{X,n}^2$  qui est la force du puits  $n$  vis-à-vis du DP  $X$  et  $\omega = 4\pi R_c(D_i + D_v)$  qui est l'efficacité de recombinaison de la matrice avec  $R_c$ , le rayon de recombinaison. Ce rayon est évalué à 1nm par Macewen dans [Macewen 84].

La cinétique d'évolution de la population de DP générée par l'irradiation est donc totalement contrôlée par les équations de cinétique chimique V.14. Deux choses importantes sont à noter dans ces équations, il s'agit là de deux équations différentielles non linéaires asymétriques à cause de la différence de force totale de puits vu par les interstitiels et par les lacunes. Le terme d'évolution chimique est associé à un système homogène dont l'équation d'évolution est régie par les concentrations et non par les distributions locales de concentrations.

Selon la force des puits présents dans la microstructure et la mobilité des DP, le profil des concentrations en DP peut varier. On peut néanmoins en retirer plusieurs régimes de fonctionnement, communs à tous les cas de figure.

- Dans les tous premiers instants de l'irradiation, la création de DP se fait sans recombinaison et leurs concentrations suivent une loi linéaire en fonction du temps.

- Si l'efficacité de recombinaison des défauts de la matrice est suffisante, on peut voir apparaître un pallier où les concentrations en lacunes et en interstitiels sont égales et constantes. Ce sont les recombinaisons entre DP qui dominent dans ce régime.
- Dans un troisième temps, les puits de défauts se mettent en marche et éliminent préférentiellement des interstitiels d'où une diminution de la concentration associée. L'accumulation de lacunes sous l'effet des dommages d'irradiation n'est pas compensée et la concentration en lacunes augmentent.
- Si la densité de puits est très importante, ou si l'on est dans un régime de haute température (diffusion très rapide des interstitiels devant la diffusion lacunaire), la phase de mise en place des défauts sans recombinaison sera directement suivie par un palier de concentrations interstitiels et une augmentation linéaire de la concentration lacunaire. Dans ce régime, la condensation des interstitiels sur les puits contrebalance la production d'interstitiels mais la concentration en lacunes continue à croître linéairement.
- Au bout d'un certain temps, la concentration en lacunes devient telle que les puits se mettent à absorber des lacunes. Il en résulte une stabilisation de la concentration en lacunes et la concentration en interstitiels se stabilise sous l'impact d'une mobilisation des puits pour la condensation des lacunes.

Les différents cas de figure envisagés ci-dessus sont représentés sur les figures V.6. Ils dépendent donc de trois paramètres : la température, l'efficacité de recombinaison de DP de la matrice et la force totale des puits.

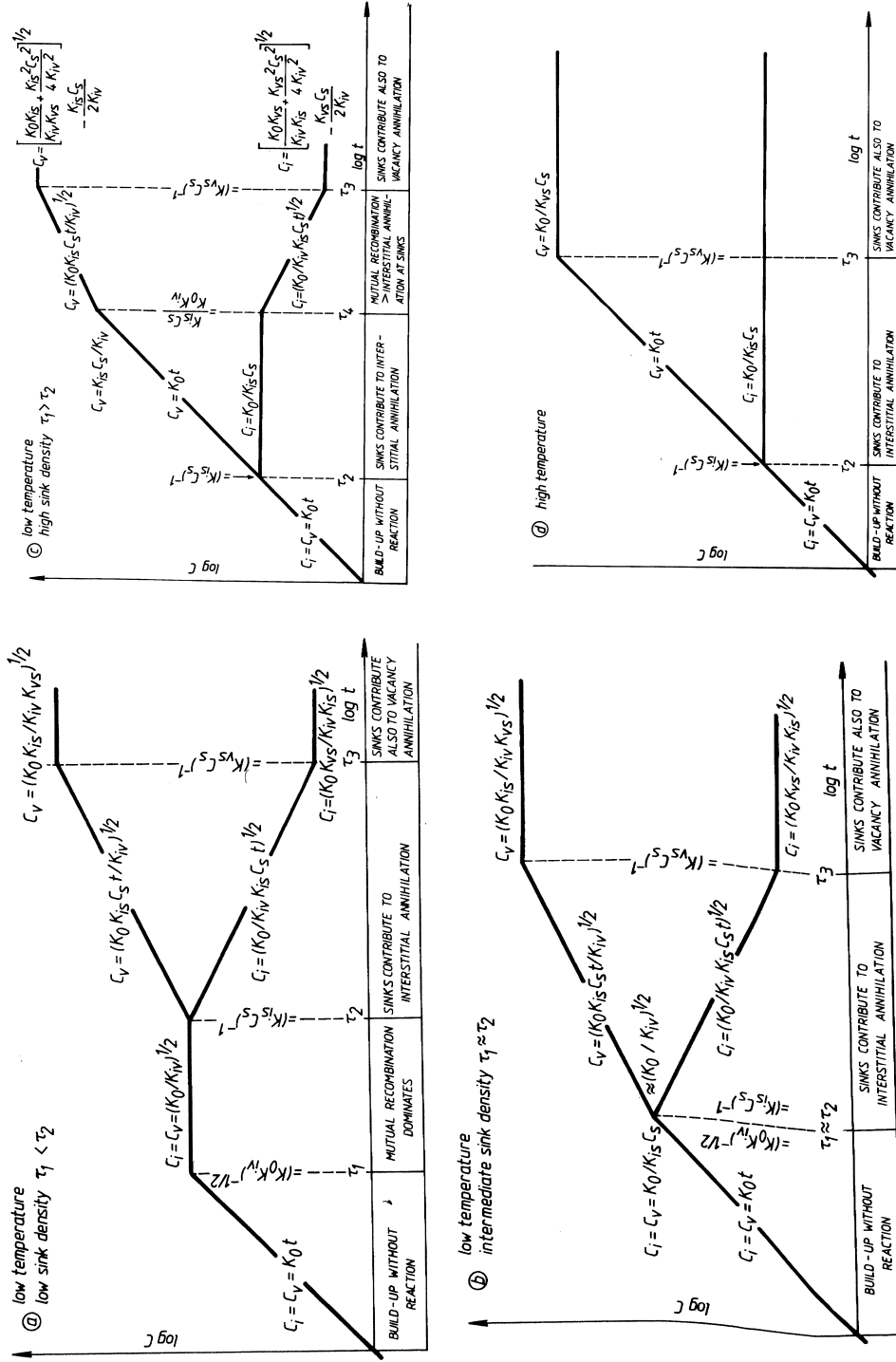


FIG. V.6 – Profil des concentrations en DP dans le temps en fonction de la température et de la force des puits [Sizmann 78].

## V.3 Constats expérimentaux et analyses micromécaniques

### V.3.1 Croissance libre

L'irradiation d'un monocristal de zirconium provoque une contraction de la maille hexagonale suivant la direction  $\langle c \rangle$  et un allongement dans le plan de base. Associée à une texture fortement radiale, caractéristique des alliages de zirconium, la croissance libre des monocristaux s'exprime, à l'échelle macroscopique, par un allongement suivant la direction de laminage et une diminution de son épaisseur. Ajoutons qu'il a été montré que cette déformation opérait à volume constant [Holt 04].

L'évolution caractéristique de la déformation axiale d'un tube en Zy-4 recristallisé soumis à un flux neutronique est montrée à la figure V.7. Comme on peut le voir sur cette figure, on peut décomposer en trois stades la cinétique de croissance.

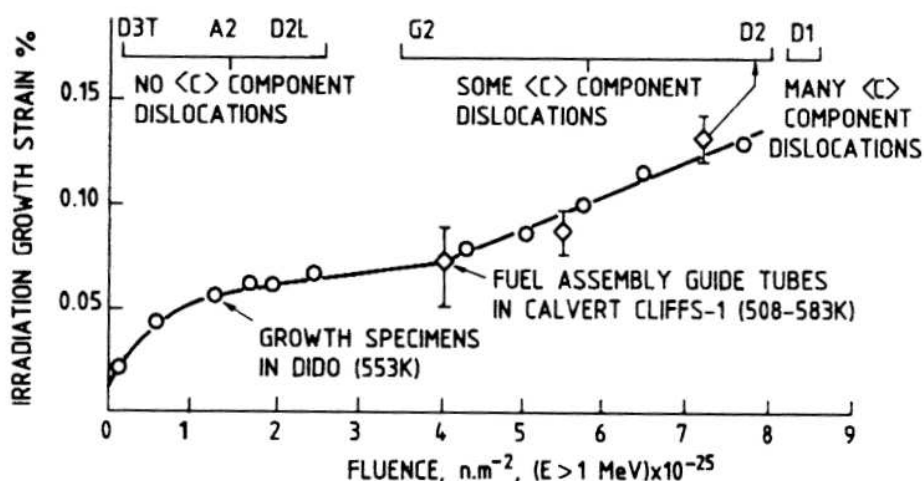


FIG. V.7 – Mise en évidence expérimentale du phénomène de croissance sur un alliage Zy-4 recristallisé [Fidleris 88].

Au cours du stade I, la vitesse de déformation diminue progressivement jusqu'à atteindre une valeur stationnaire, très faible, caractéristique d'un stade II de fluage. Cette diminution de la cinétique de croissance peut être reliée à l'état métallurgique du produit. En effet, en début d'essai, l'échantillon possède une densité de dislocations très faible puisque le produit est dans un état métallurgique recristallisé et qu'il est non déformé. Ce sont donc majoritairement les joints de grain qui vont contribuer à la force totale de puits. Les faces orientées parallèlement aux plans de bases et à l'axe  $c$  absorberont respectivement plus de lacunes et d'interstitiels conduisant à une vitesse de croissance élevée.

Lors du stade II, la vitesse de croissance devient stationnaire et très faible. La densité de défauts cristallin, en particulier les boucles  $\langle a \rangle$ , a fortement augmentée et ceux-ci constituent la majeure partie des puits de DP. Les dislocations rectilignes de type  $\langle a \rangle$  sont seulement très légèrement biaisées en faveur des SIA expliquant la vitesse de croissance mesurée très faible. En ce qui concerne les lacunes en sursaturation, elles s'éliminent sur les boucles  $\langle a \rangle$  et ne jouent que sur le durcissement du fluage thermique du matériau.

Enfin, l'accélération de croissance observée dans les Zircaloy au delà d'une dose critique, a clairement été corrélée à l'apparition de boucles de dislocations à composante  $\langle c \rangle$  résultat de l'instabilité des précipités intermétalliques sous irradiation et de l'augmentation de la teneur en fer de la matrice [de Carlan 96]. Les dislocations à composante  $\langle c \rangle$  étant des puits pour les lacunes, la nouvelle répartition des DP sur les puits de la microstructure explique une vitesse de croissance sensiblement plus élevée. Dans le cas d'un alliage détendu, des dislocations à composante  $\langle c \rangle$  sont déjà présentes dans la microstructure d'origine. Il en résulte que la cinétique de croissance est tout de suite très rapide et de plusieurs ordres de grandeur supérieure à la cinétique du stade II d'un alliage recristallisé.

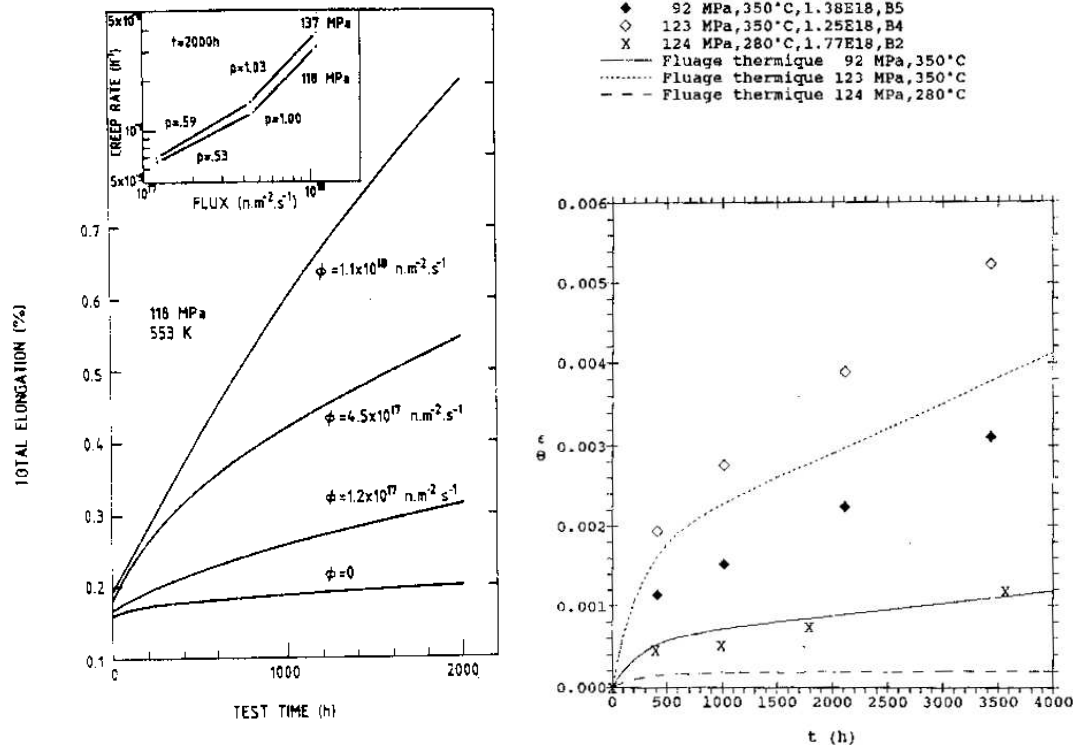
Pour modéliser ce phénomène d'accélération de croissance, on peut penser introduire une variable interne correspondant à une concentration en élément stabilisant de dislocations  $\langle c \rangle$  qui évolue en fonction de la dose reçue. Si cette concentration est supérieure à une concentration critique, alors on développe un réseau de dislocations à composante  $\langle c \rangle$  suivant une certaine cinétique nous permettant d'évaluer la densité de dislocations  $\langle c \rangle$  et donc la force du puits associée.

D'un point de vue expérimental, il est souvent délicat de décorrélérer, dans un essai de fluage d'irradiation, la part de déformation de croissance pure et de fluage d'irradiation. C'est la raison pour laquelle, dans le meilleur des cas, on réalise deux essais en parallèle, l'un contraint et l'autre non contraint afin de retrancher à l'essai de fluage d'irradiation la part de croissance. Ainsi, on est capable de décorrélérer les deux contributions à la déformation induite par le flux rapide en supposant un découplage des phénomènes. On peut cependant se demander dans quelle mesure il est pertinent de vouloir décorrélérer croissance et fluage d'irradiation, si l'on considère que ces deux phénomènes macroscopiquement observés proviennent d'un même mécanisme d'élimination des DP modifié par l'application d'une contrainte. De plus, la croissance libre des grains conduit nécessairement à des incompatibilités de déformation entre grains et donc à l'établissement de contraintes internes qui, si elles sont élevées, doivent être relaxées par viscoplasticité. On déduit de cette remarque un couplage entre les phénomènes de croissance libre et de fluage sous irradiation.

### V.3.2 Fluage sous irradiation

Il convient tout d'abord de bien faire la différence entre le fluage sous irradiation et fluage d'irradiation. Dans le premier cas, la déformation englobe la partie thermiquement activée (fluage thermique) et celle activée par l'action conjuguée de la contrainte et du flux neutronique (fluage d'irradiation). Dans le second cas, il s'agit uniquement de la partie de la déformation activée par la contrainte et le flux.

Comme on l'a vu précédemment, l'élimination biaisée des lacunes et des interstitiels sur les dislocations conduit à une accélération des phénomènes de montée des dislocations expliquant une vitesse de fluage accrue sous irradiation [Ewen 75, Soniak 92].



(a) Traction uniaxiale sous flux à 118 MPa et à (b) Accélération de la vitesse de fluage sous flux 280 °C sur du Zy2 [Tinti 83]

FIG. V.8 – Mise en évidence expérimentale du phénomène de fluage d'irradiation.

De la même manière que pour la croissance, le fluage sous irradiation peut se décomposer en plusieurs stades. Au cours du stade I, la vitesse de fluage diminue progressivement jusqu'à atteindre une valeur stationnaire beaucoup plus élevée qu'en fluage thermique. La diminution de la vitesse de déformation observée pendant le stade I peut être corrélée au durcissement du fluage thermique sous l'effet des boucles de disloca-



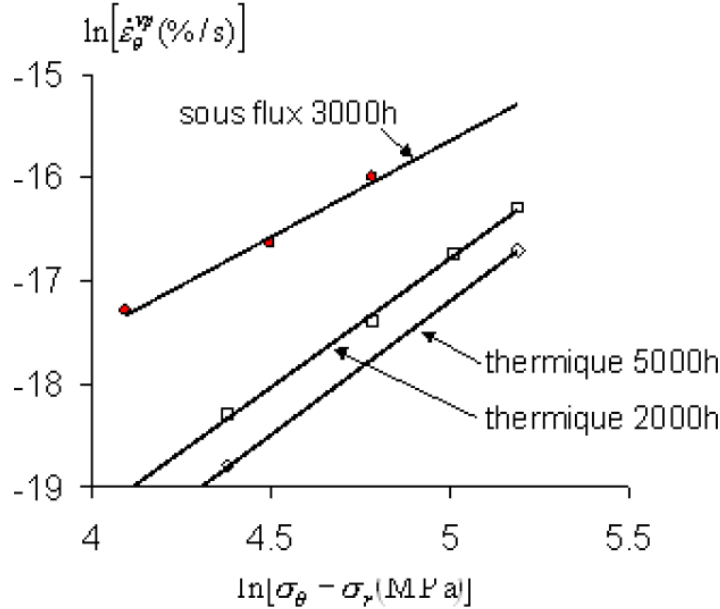


FIG. V.9 – Evolution de la vitesse de fluage (à 350°C) hors flux (thermique non irradié) et sous flux pour une même durée de fluage en fonction de la contrainte [Delobelle 02].

tions et des dislocations produites par la déformation plastique ("arbres de la forêt"). En régime stationnaire, les concentrations en lacunes et interstitiels demeurent constantes. Durant ce stade, la matrice se retrouve sursaturée en DP si bien que dès qu'un nouveau DP est crée, il est tout de suite annihilé sur un des puits de la microstructure. Il en résulte alors une vitesse d'absorption constante des DP par le réseau de dislocations expliquant une vitesse de montée constante, et donc une vitesse de déformation viscoplastique constante de l'échantillon irradié.

En service, l'irradiation provoque une accélération de la cinétique de déformation (cf Fig. V.8 et V.9) et la communauté scientifique s'accorde à dire que le mécanisme de montée, qui était inopérant aux températures d'utilisation pour des sollicitations hors flux, devient très important sous flux dans la même gamme de températures. On pourrait donc se contenter de dire que le fluage sous irradiation est contrôlé par la montée des dislocations, mais le glissement des dislocations demeure un mécanisme capable d'expliquer une part de la déformation enregistrée sous flux.

### V.3.3 Fluage thermique

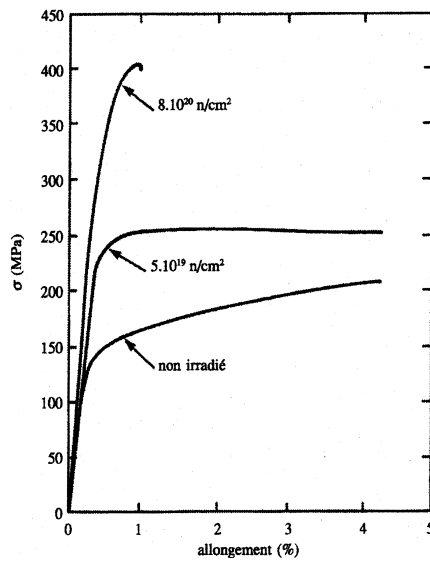
#### V.3.3.1 Fluage thermique sous flux

Il est difficile de séparer la partie thermiquement activée de la déformation de la partie activée par le flux. La définition de la frontière entre les deux domaines reste

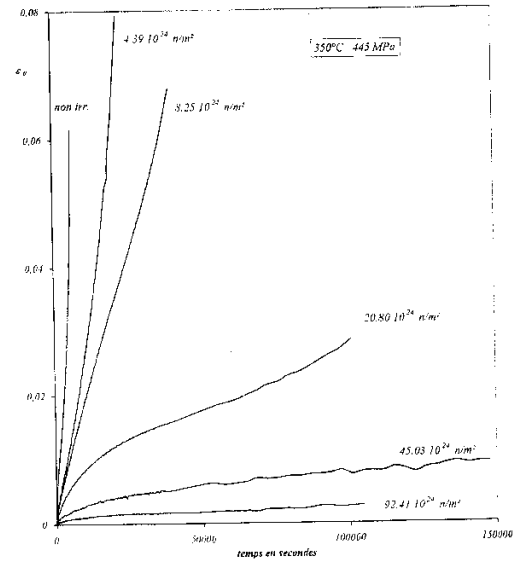
très floue. Cependant, on peut d'ores et déjà affirmer qu'à haute température, et pour des niveaux de contrainte élevés, c'est le fluage thermique *via* le glissement des dislocations qui va imposer sa cinétique de déformation alors que dans le cas contraire, à basse contrainte et basse température, c'est le fluage d'irradiation qui, via la montée des dislocations, va expliquer la déformation observée. En terme de modélisation, si l'on parvient à décrire les mécanismes de déformation dans une gamme de température et de contrainte assez large, on pourra peut être définir de façon plus précise cette frontière.

#### V.3.3.2 Fluage thermique hors flux sur matière irradiée

Le phénomène de fluage thermique sur matière irradiée a largement été étudiée par le passé [Onimus 03, Ribis 07]. Il concerne surtout la problématique du transport et du stockage des déchets. Il est maintenant acquis que le durcissement du matériau constaté, aussi bien en écrouissage (cf Fig. V.10(a)) qu'en fluage (cf Fig. V.10(b)), peut être attribué aux boucles de dislocations prismatiques induites par l'irradiation.



(a) Mise en évidence du durcissement induit par l'irradiation sur des essais de traction sur matériau irradié [Onimus 03]



(b) Effet de l'irradiation sur la vitesse de fluage thermique en pression interne sur du Zy4 détendu [Hugot 99]

FIG. V.10 – Durcissement des alliages de zirconium après irradiation.

Comme le glissement prismatique est le glissement "facile" sur matériau vierge, le matériau irradié ne peut plus s'écouler suivant ces plans puisque l'interaction boucles prismatiques / dislocations durcit considérablement les systèmes de glissement prismatiques d'une manière analogue à un écrouissage du type "arbres de la forêt". Pour obtenir

le même niveau de déformation, le niveau de contrainte appliquée devra donc être plus important. Un mécanisme de canalisation basale a été observé expérimentalement en MET dans les alliages de Zr (cf Fig. V.11) et modélisé par une approche micromécanique par Onimus [Onimus 06]. Cet auteur montre que la canalisation est bien le mécanisme qui gouverne le comportement mécanique d'un alliage de zirconium irradié.

Plus précisément, *"ce mécanisme consiste, en premier lieu, en un balayage des boucles  $< a >$  issues de l'irradiation par les dislocations glissant dans le plan de base. Dès lors que les obstacles sont balayés dans une partie du grain, les dislocations suivantes glissent préférentiellement dans cette zone conduisant ainsi à un phénomène de canalisation des dislocations et donc de localisation de la déformation plastique à l'échelle du grain ..."* ([Onimus 03], pp. 177).

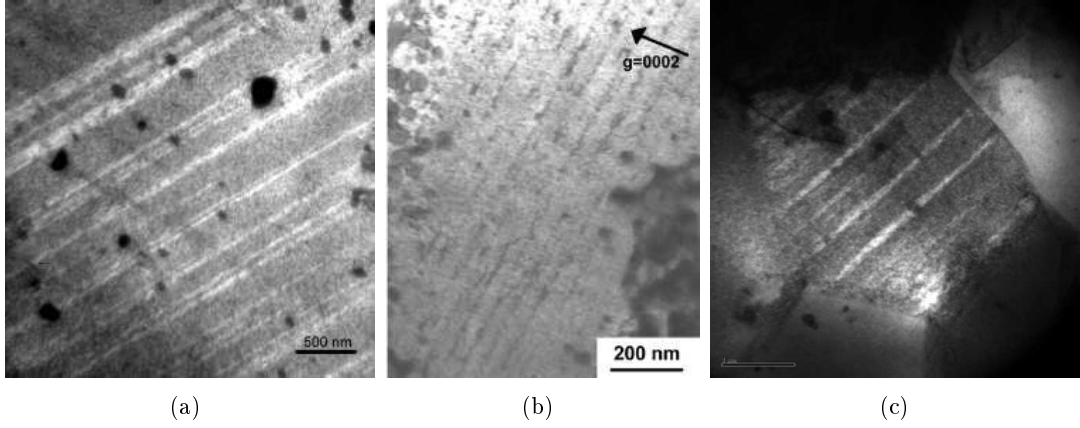


FIG. V.11 – Mécanisme de canalisation basale de la déformation observé sur une lame irradiée (a) aux ions lourds  $Zr^+$  [Onimus 03], (b) aux neutrons et (c) aux protons ( $\epsilon^{vp} = 0.5\%$  et  $\phi_t = 2 \text{ dpa}$ ) [Serres 07].

### V.3.4 Mécanismes de déformation sous irradiation

La difficulté d'expérimentation et d'observation *in situ* de matériaux sous flux rend délicate l'interprétation des résultats en terme de mécanismes de déformation microscopique. Nombre de modèles de fluage d'irradiation ont été proposés sans pouvoir être totalement réfutés ou confortés par l'expérience. Cependant, certains modèles sortent du lot grâce à leur capacité à reproduire certains résultats caractéristique du fluage d'irradiation. La proportionnalité de la cinétique de déformation sous irradiation au flux rapide et à la contrainte étant désormais acquise, les modèles prédisant des dépendances différentes peuvent être écartés.

Les mécanismes de déformation introduits dans les modèles sont généralement de deux types. Dans un premier cas, la déformation est supposée provenir directement de la

condensation des DP sur les puits de la microstructure, les modèles de type SIPA (Stress Induced Preferential Absorption) et SIPN (Stress Induced Preferential Nucleation) appartiennent à cette catégorie. Dans un second cas, on suppose que c'est le glissement des dislocations favorisé par la montée induite par l'absorption de DP qui est à l'origine de la déformation. L'objectif de cette partie est de faire un point sur les modèles de fluage d'irradiation existants à l'heure actuelle. Notons qu'une synthèse des modèles de fluage d'irradiation a été publiée dans [Matthews 88].

#### V.3.4.1 Stress Induced Preferential Absorption (SIPA)

Le mécanisme d'absorption préférentielle des DP induit par la contrainte a été proposé indépendamment et pour la première fois par Heald et Speight [Heald 74] et par Wolfer et Ashkin [Wolfer 75]. Il a été ensuite développé par Bullough et Willis [Bullough 75b], Bullough et Hayns [Bullough 75a] et Bullough et Wood [Bullough 80].

Soumis à un champ de contrainte  $\sigma_a$ , un cristal se déforme différemment autour d'un DP par rapport au réseau parfait et la différence de déformation  $\delta\varepsilon$  est directement proportionnelle à  $\sigma_a$ . Dans l'hypothèse où l'énergie d'interaction entre le DP et le champ de contrainte est proportionnel au produit  $\sigma_a\delta\varepsilon$  [Eshelby 57], c'est-à-dire  $\sigma_a^2$ , comme  $\sigma_a$  résulte de l'application d'une contrainte extérieure mais aussi des champs de contraintes internes développés par le réseau de dislocations, il en résulte que  $\sigma_a^2$  contient des termes de couplage faisant dépendre le taux d'absorption des DP de l'orientation des dislocations par rapport à la contrainte. Ce mécanisme SIPA, schématisé à la figure V.12, participe donc à l'évolution dimensionnelle des alliages de Zr en réacteur par une activation de la montée des dislocations.

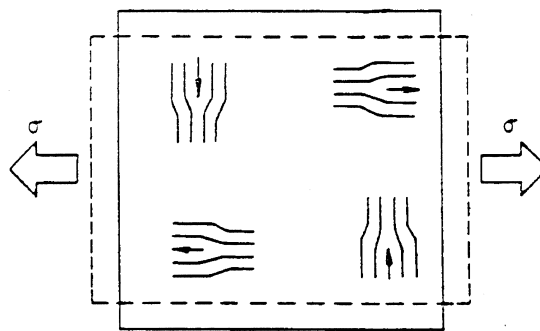


FIG. V.12 – Schéma de principe du SIPA.

Woo a montré [Woo 79] que si l'on considère  $N$  classes de dislocations coin dans un matériau dont les vecteurs de Burgers  $\underline{b}_n$  font un angle  $\phi_n$  avec la contrainte alors la vitesse de déformation viscoplastique  $\dot{\varepsilon}^{vp}$  due à la montée des dislocations s'écrit :

$$\dot{\varepsilon}^{vp} \propto \phi \sigma S_c(f_n, \phi_n) \quad (\text{V.15})$$

où  $\phi$  est le flux de neutrons,  $\sigma$  est la contrainte et  $S_c(f_n, \phi_n)$  est le facteur de structure du réseau de dislocations et s'écrit :

$$S_c(f_n, \phi_n) = \sum_{n=1}^N f_n \cos^2 \phi_n \left( \cos^2 \phi_n - \sum_{k=1}^N f_k \cos^2 \phi_k \right) \quad (\text{V.16})$$

avec  $f_n = \frac{\rho_n}{\sum_n \rho_n}$  la proportion de dislocations appartenant à la classe  $n$ .

Ce résultat montre donc que la vitesse de fluage imposée par un mécanisme de type SIPA dépend de l'orientation de réseau de dislocations par rapport à la contrainte appliquée. Plus précisément, c'est le facteur de structure du réseau de dislocations qui permet de quantifier cet effet d'orientation. Pour conclure, on peut ajouter à ce modèle les effets de l'anisotropie de diffusion (DAD) et on obtient un modèle de fluage d'irradiation basé sur l'élastodiffusion [Woo 84].

#### V.3.4.2 Stress Induced Preferential Nucleation (SIPN)

Le modèle de germination préférentielle des boucles induites par la contrainte est fondé sur l'idée que la probabilité de germination d'une boucle de dislocations interstitielle est plus importante dans les plans perpendiculaires à la direction de la contrainte. Réciproquement, cette probabilité pour les boucles de dislocations lacunaires est plus importante dans les plans parallèle à la direction de la contrainte. De cette manière, le matériau s'allonge dans la direction de la contrainte appliquée résultant en une déformation de fluage. Cependant, ce mécanisme de déformation sous flux ne semble intervenir que dans les matériaux recuits et à faible dose. Notons que la caractéristique la plus importante est qu'une fois le plan de germination des boucles choisi, le taux de déformation devrait être contrôlé par le flux neutronique mais ne serait plus fonction du niveau de contrainte appliquée. Ceci indique alors que le fluage devrait se poursuivre même si la contrainte est retirée. Ce mécanisme de déformation ne semble donc pas être le plus pertinent.

#### V.3.4.3 Climb Plus Glide (CPG)

Dans ce modèle, la montée des dislocations n'est pas la cause directe de la déformation mais permet un franchissement des obstacles plus aisé. Le niveau de déformation atteint est dans ce cas contrôlé par le glissement des dislocations mais la vitesse de fluage est, elle, contrôlée par le mécanisme le plus lent, c'est-à-dire la montée puisqu'elle fait intervenir des mécanismes diffusionnels. Plusieurs modèles fondés sur ce mécanisme ont été proposés et certains sont détaillés ci-après.

- Le I-creep proposé par Gittus en 1972 [Gittus 72] décrit l'interaction entre les DP et les dislocations uniquement par l'effet Cottrell de premier ordre (différence de

volume de relaxation entre les lacunes et les interstitiels).

- Le PAG (Preferred Absorption Glide) creep proposé par Mansur en 1979 [Mansur 79] met en jeu l'effet de contrainte élastique d'Eshelby et la montée est contrôlée par un mécanisme de type SIPA. Ce modèle prévoit une dépendance quadratique à la contrainte, par conséquent, il ne semble pas être adapté à notre situation.
- Le "Yielding creep" [Roberts 56, Gittus 73] suppose que l'écoulement viscoplastique ne peut se produire que lorsque les niveaux de contraintes internes sont suffisamment élevés, celles-ci résultant principalement de l'incompatibilité de déformation intergranulaire.

#### V.3.5 Proposition d'une démarche de modélisation

L'idée est de proposer une démarche intégrant les mécanismes décrits précédemment dans le but de prédire le comportement mécanique des alliages de zirconium pour différents types de sollicitations (thermomécaniques et neutroniques). L'approche envisagée pour modéliser les phénomènes de déformation sous irradiation est développée dans cette partie et doit être facilement intégrable dans le formalisme micromécanique introduit dans le chapitre IV. La stratégie de transfert de connaissance du modèle micromécanique vers un modèle purement macroscopique proposée dans le chapitre précédent doit pouvoir s'appliquer dans ce contexte. Par exemple, on peut penser qu'un modèle à trois surfaces (Prismatique, Basale et Non Prismatique Non Basale) pourrait aboutir à une bonne description de comportement en fluage thermique sur matériau irradié.

Au cours de la déformation plastique et de l'irradiation d'un alliage métallique, la densité de puits évolue au sein de la microstructure. Or, la force de puits est directement proportionnelle à la densité de puits qu'il est donc nécessaire d'évaluer afin d'estimer les flux de DP vers les puits de la microstructure.

##### V.3.5.1 Evolution de la densité de puits

###### Densité de dislocations

L'évolution de la densité de dislocations est donnée grâce à l'équation bilan V.17.

$$\frac{d\rho_s}{dt} = \frac{\dot{\gamma}_s^0(T)}{b} \left[ \frac{1}{\lambda} - 2y_s\rho_s \right] - B(T) (\rho_s - \rho_s^0)^n \quad (\text{V.17})$$

Dans l'équation V.17, le premier terme correspond à un bilan entre production des dislocations par un mécanisme de Frank et Read et annihilation des dislocations, et le second terme correspond à la restauration thermique de la densité de dislocations.

### Boucles de dislocations

Il est maintenant admis que la microstructure d'un alliage de zirconium irradié est essentiellement constituée de boucles de dislocations prismatiques  $\langle a \rangle$  [Northwood 79]. Comme on peut le voir sur la figure V.13, la densité de boucles et le rayon moyen tend à saturer rapidement sous irradiation. La valeur à saturation dépend fortement de la température, plus la température augmente et plus la densité diminue et le rayon moyen augmente. Le modèle de dynamique d'amas développé par Christien et Barbu [Christien 05] a permis de reproduire les observations expérimentales faites par Hellio [Hellio 88] sur du zirconium pur irradié aux électrons.

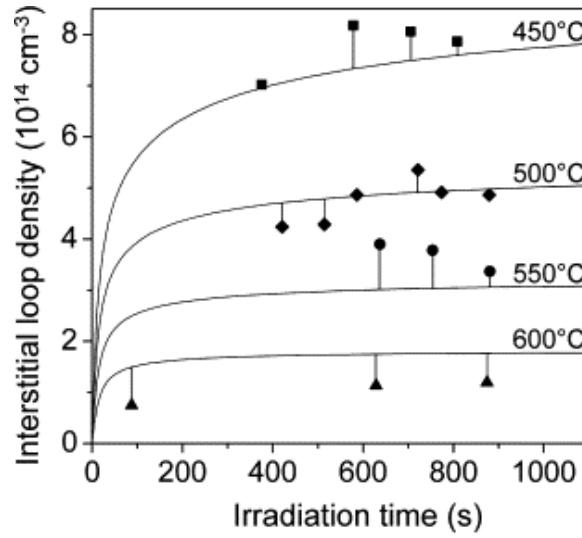


FIG. V.13 – Evolution dans le temps de la densité de boucles interstitielles : Comparaison modèle / expérience [Hellio 88, Christien 05].

Les différences dans les jonctions créées entre dislocation et boucle conduisent à des durcissements différents suivant les systèmes considérés. En terme de modélisation, l'effet des boucles pourra donc s'écrire comme une augmentation de la cission critique du système de glissement associé au plan d'habitat de la boucle [Foreman 68] :

$$\Delta\tau_c = \alpha_b \mu b \sqrt{Nd} \quad (\text{V.18})$$

avec  $\Delta\tau_c$  le durcissement du système  $s$ ,  $\alpha_b$  une constante qui dépend du type de boucle,  $N$  la densité de boucle et  $d$  le diamètre moyen des boucles.

La volonté de décrire les mécanismes de déformation microscopique dans un modèle polycristallin n'est pas antinomique avec l'introduction d'une part de phénoménologie dans celui-ci. Même si des modèles physiques déjà existants [Christien 05, Ribis 07] per-

mettent d'expliquer l'évolution des boucles de dislocation dans les alliages de zirconium, il paraît judicieux de décrire leurs évolutions par des modèles plus simples afin de réduire les temps de calcul. L'objectif est de connaître la loi d'évolution des grandeurs caractéristiques des boucles pour en déduire l'évolution du durcissement associé. En supposant un comportement saturant de la microstructure de boucles en réacteur dans les alliages de zirconium, on peut par exemple décrire cette évolution par une loi saturante de type exponentielle V.19.

$$\begin{cases} d(t) &= d_{sat}(T, \phi) \left[ 1 - \exp\left(-\frac{t-t_0}{t_0}\right) \right] \\ N(t) &= N_{sat}(T, \phi) \left[ 1 - \exp\left(-\frac{t-t_0}{t_0}\right) \right] \end{cases} \quad (V.19)$$

La connaissance de l'évolution des grandeurs caractéristiques (taille à saturation ( $d_{sat}$ ), densité à saturation ( $N_{sat}$ ), temps de saturation ( $t_0$ )) des boucles avec la température et le flux permettrait de décrire les effets de ces boucles sur le comportement mécanique de l'alliage pour une large gamme d'utilisation. Notons également que, bien que la coexistence des boucles lacunaires et interstitielles ait été démontrée dans les alliages de zirconium, nous considérons que la contrainte de franchissement d'une boucle ne dépend pas de son caractère.

Les joints de grains constituent également des puits de DP dont la densité reste constante au cours du temps. L'impact des joints de grains sur le comportement sous irradiation dépend essentiellement de l'état métallurgique du matériau considéré. Un état recristallisé est caractérisé par une microstructure équiaxe alors que les grains d'une microstructure détendue sont très allongés dans la direction de laminage. On peut donc penser que la texture morphologique des alliages détendus contribuera à l'anisotropie de comportement sous irradiation.

Les éléments en solution solide dans la matrice peuvent également constituer des puits dans le sens où ils peuvent former des sites de piégeages des DP [Savino 80, Bullough 80] ou réduire la mobilité des DP dans la matrice. La densité de puits correspondante est fixée par la composition chimique de l'alliage. On peut cependant penser que cet effet de piégeage est un effet du second ordre et qu'il peut être intégré dans le terme de recombinaison élastique de la matrice.

### V.3.5.2 Vitesse de déformation

Les mécanismes de montée et de glissement opèrent sur la même population de dislocations. L'idée est de trouver une méthode permettant d'imbriquer ces deux mécanismes. Le flux net de DP absorbé par les dislocations causées principalement par la différence d'anisotropie de diffusion entre les lacunes et les interstitiels et par l'effet SIPA provoquent leur montée. On peut écrire le taux de déformation en considérant un terme de montée et un terme de glissement ( $c$  comme "climb" et  $g$  comme "glide").

$$\underline{\dot{\epsilon}}^{vp} = f_g \dot{\underline{\epsilon}}^g + f_c \dot{\underline{\epsilon}}^c \quad (V.20)$$



Les deux paramètres,  $f_g$  et  $f_c$ , introduits dans cette expression représentent respectivement la proportion de dislocations mobiles qui glissent pour l'un et qui montent pour l'autre. Si l'on suppose que toutes les dislocations mobiles vont soit glisser soit monter, on a alors la relation  $f_c = 1 - f_g$ . Si de plus, on se souvient que seules les composantes coins des dislocations sont susceptibles de monter et que ce sont principalement les composantes vis qui vont glisser, la relation  $f_c = 1 - f_g$  revient à considérer un modèle vis/coin c'est-à-dire que la proportion  $f_g$  correspond également à la fraction vis de la densité de dislocation mobile et  $f_c$  à la fraction coin.

Dans l'équation V.20, les contributions respectives à la déformation viscoplastique de la montée et du glissement peuvent s'exprimer de la façon suivante :

$$\underline{\dot{\epsilon}}^c = \sum_{l=1}^L \phi_l \rho_l \underline{\mu}^l \quad (\text{V.21})$$

$$\underline{\dot{\epsilon}}^g = \sum_{s=1}^S \dot{\gamma}_s \underline{\mu}^s \quad (\text{V.22})$$

Dans l'équation V.21 [Woo 00],  $\phi_l$  est le flux net de DP absorbé par une dislocation de la classe  $l$  (cf Eq. V.10) et  $\underline{\mu}^l$  est le tenseur d'orientation associé aux "systèmes de montée" introduit par Lebensohn dans [Lebensohn 10]. Dans l'équation V.22,  $\dot{\gamma}_s$  est le taux de cisaillement du système de glissement  $s \in S$  obtenu à l'aide d'une loi d'écoulement en sinus hyperbolique et  $\underline{\mu}^s$  est le tenseur d'orientation du système de glissement associé.

La démarche de modélisation proposée dans cette partie s'appuie donc sur les modélisations polycristallines déjà existantes pour les alliages de zirconium et sur l'intégration des mécanismes imputables aux effets de l'irradiation. En théorie, ce modèle permettrait d'accéder à des informations qui sont très peu connues à l'heure actuelle comme la séparation fluage thermique / fluage d'irradiation par exemple. Dans la pratique, le développement de ce modèle nécessite la constitution d'une base de données représentative du comportement mécanique des alliages de zirconium sous flux qui est, sans doute, trop partielle à l'heure actuelle.

---

# Conclusions & Perspectives

---

## Conclusions

Les alliages de zirconium sont des matériaux stratégiques dans le domaine du nucléaire. Ils constituent le matériau de gainage du combustible dans les réacteurs à eau sous pression et remplissent à ce titre une fonction de première importance dans les assemblages combustibles. Le gainage doit assurer le confinement des radionucléides ainsi qu'un bon transfert thermique entre les pastilles d'uranium et le fluide caloporteur. Dans une centrale, le combustible nucléaire est un consommable qu'il est nécessaire de renouveler régulièrement pour maintenir le niveau de puissance constant dans un réacteur. Dans ce contexte, un gain de performance constitue une réelle avancée dans l'exploitation des centrales nucléaires.

Cette étude s'inscrit dans cette démarche d'amélioration à long terme du matériau de gainage dans le sens où elle tente d'apporter une contribution à une meilleure compréhension du comportement en fluage thermique des alliages de zirconium.

Les résultats d'une étude antérieure [Grosjean 09] sont exploités dans ces travaux dans le but de caractériser le comportement en fluage multiaxial à 400°C d'un alliage Zy-4 recristallisé qui est le principal matériau étudié dans ces travaux. Dans cette campagne d'essais, les éprouvettes tubulaires sont sollicitées en traction/pression interne. Dans le but d'obtenir une estimation de l'anisotropie, les déformations axiale et diamétrale sont mesurées par extensométrie laser. Une méthode de dépouillement des essais est mise en place pour s'assurer de la stationnarité de l'écoulement en stade II. Les résultats des essais sont analysés en terme de surfaces isovitesse stationnaire et l'anisotropie de comportement en fluage est analysée à la lumière d'un formalisme micromécanique. On met en évidence cette forte anisotropie de comportement en fluage en superposant les surfaces obtenues expérimentalement aux surfaces elliptiques simulées par un critère de von Mises. La confrontation des cartographies des facteurs de Schmid dans le triangle standard à la texture cristallographique projetée dans la direction de sollicitation, indique qu'une plus grande proportion de phases cristallographiques sont favorablement orientées pour le glissement prismatique pour des chargements uniaxiaux suivant  $z$  que

pour des chargements en pression pure.

Les éprouvettes sollicitées en fluage ont été analysées en microscopie électronique en transmission [Rautenberg 09]. Il en ressort que le glissement prismatique reste le mécanisme de déformation majoritairement observé dans les alliages de zirconium recristallisés sollicités en fluage à 400°C pour des vitesses de déformation inférieures à  $10^{-6}\text{s}^{-1}$ . Le glissement dévié des dislocations vis des plans prismatiques vers les plans pyramidaux de première espèce est également fréquemment observé. On observe de plus une activité non négligeable des systèmes de glissement  $\pi_1\langle a \rangle$  et pas de dislocations  $\langle c+a \rangle$ .

Un protocole de caractérisation du comportement en relaxation sur machine Gleeble a été mis en place au cours de cette étude. Le comportement du Zy-4 recristallisé est étudié entre 280°C et 430°C par le biais d’essais de relaxation multiples. Dans cette campagne d’essais, les éprouvettes sont sollicitées en traction uniaxiale suivant  $z$  et les déformations diamétrales sont mesurées par extensométrie mécanique. L’exploitation des résultats expérimentaux fait très clairement apparaître des manifestations macroscopiques des effets du vieillissement dynamique. On observe, en accord avec les données de la littérature, un palier “athermique” dans lequel la limite d’écoulement évolue peu avec la température. On montre, de plus, que le volume d’activation apparent, déterminé à partir des mesures expérimentales, atteint un maximum autour de 350°C. Ces observations sont à relier à une très faible sensibilité de l’écoulement viscoplastique à la vitesse de déformation au voisinage de cette température.

Souhaitant fonder notre démarche de modélisation micromécanique sur une règle de transition d’échelle robuste, des calculs EF d’agrégats ont été mis en place. Dans le but d’exacerber l’anisotropie du monocristal et de réduire les durées de simulation, nous supposons, dans ces calculs, que seul le glissement prismatique est actif. Nous proposons dans cette étude un protocole de calcul permettant d’estimer la réponse mécanique moyenne d’une phase cristallographique plongée dans un MHE. L’estimateur statistique proposé, fondé sur un schéma itératif, permet de retrouver la solution théorique fournie par le modèle auto-cohérent en élasticité cubique et possède de bonnes propriétés de convergence. Une base de données, constituée de la réponse moyenne de quatre phases cristallographiques à des sollicitations de traction et de cisaillement, est alors élaborée en suivant le schéma préconisé. En considérant la solution EF de référence, nous montrons que les modèles de Kröner-Weng et de Berveiller-Zaoui prédisent des réponses moyennes respectivement trop raides et trop souples par rapport à l’estimation EF. Dans ce contexte, la règle en  $\beta$  permet de trouver un compromis intéressant entre les deux modèles. On conclut dans cette partie qu’il est nécessaire, pour les alliages hexagonaux avec uniquement trois systèmes prismatiques, d’ajuster les paramètres de la règle en  $\beta$  sur des calculs d’agrégats. Enfin notons que l’ensemble des modèles éprouvent des difficultés à décrire l’écoulement viscoplastique des phases dont l’activité plastique est faible (associées à un angle  $\Phi$  faible). Pour résoudre ce problème, nous proposons d’ajouter dans la règle de localisation un terme relatif à la symétrie hexagonale des

phases ainsi qu'un terme diffus relatif à la plasticité de milieu environnant.

L'anisotropie du comportement mécanique des alliages de zirconium provient de la structure hexagonale faiblement symétrique et de la texture cristallographique marquée des produits laminés. La démarche micromécanique permet de prendre en compte de façon explicite ces deux aspects dans la modélisation. Nous proposons une modélisation intégrant les observations réalisées en microscopie électronique en transmission et l'appliquons au fluage multiaxial à 400°C pour un alliage de Zy-4 recristallisé.

Sur la base des résultats obtenus par Geyer avec le modèle polycristallin à 20°C, nous montrons qu'un critère d'écoulement mixte permet de mieux décrire les observations numériques réalisées sur les surfaces de charge simulées par le modèle polycristallin. Nous proposons un modèle à deux surfaces (Prismatique et Non Prismatique) pour décrire l'interaction des systèmes de glissement secondaire avec les systèmes prismatiques. Ce modèle multimécanisme basé sur un critère d'écoulement mixte est appliqué au comportement d'un alliage Zy-4 à 20°C et à 400°C. Il permet de décrire convenablement les données expérimentales obtenues par Robinet et Geyer à 20°C et par Grosjean et Rautenberg à 400°C.

Pour terminer, une revue bibliographique des effets de l'irradiation sur le comportement mécanique des alliages de zirconium est présentée. Nous proposons une démarche pour prendre en compte les mécanismes de déformation sous irradiation dans une modélisation micromécanique. A terme, ce modèle pourra alimenter une approche simplifiée multimécanismes en incluant les systèmes de glissement basal qui ont été observés sur les alliages de zirconium irradiés.

## Perspectives

Cette étude ouvre un certain nombre de voies à explorer pour compléter ce travail de doctorat.

Concernant les règles de transition d'échelle qui ont été étudiées par l'intermédiaire des calculs EF d'agrégats polycristallins, il serait intéressant de continuer à enrichir la base de données du comportement EVP des phases cristallographiques afin de mettre en avant les capacités prédictives des règles de changement explicites et ce, malgré l'introduction de paramètres ajustables. De plus, toute la richesse des résultats des calculs EF qui ont été entrepris dans ces travaux n'a pas été exploitée. En effet, les résultats obtenus en terme de fluctuations intraphases (ou moments d'ordre 2) constituent une estimation de référence qui pourrait être utilisée par les modèles exploitant ce type d'informations. On peut penser ici aux méthodes d'ordre 2 proposées par Ponte-Castañeda *et al* qui utilisent cette information pour estimer les modules linéarisés des phases. Il serait opportun de comparer les réponses obtenues par ce type de modèles en terme de fluctuation intraphase à ces résultats EF.

En vue de montrer que l'estimation du comportement EVP d'une phase  $\varphi$  obtenue par l'estimateur  $p(\varphi)$  constitue une solution de référence, il pourrait être intéressant de comparer les résultats EF à des mesures expérimentales. Une solution pourrait être d'utiliser la diffraction neutronique *in situ* sur un grand instrument tel qu'un synchrotron pour accéder aux propriétés en volume et à l'évolution des contraintes et déformations dans les différentes phases du polycristal.

En ce qui concerne les évolutions futures des approches micromécaniques, il faudrait qu'elles puissent prendre en compte les fortes fluctuations de comportement intraphases obtenues numériquement par EF. Il y a plusieurs solutions envisageables pour aborder ce problème :

- Caractériser un polycristal non plus par des phases cristallographiques mais par l'ensemble des grains de même orientation dont le voisinage direct est proche. Cette caractérisation permettrait de remplacer l'approche auto-cohérente à un site d'un polycristal par un motif à inclusions composites et de déterminer les propriétés du milieu effectif à partir d'un modèle autocohérent généralisé.
- Remplacer dans la modélisation polycristalline le concept de phase cristallographique par des sous-phases (trois par exemple) de même orientation dont la loi de localisation serait affectée par la dispersion de contraintes dans les sous phases (un niveau bas, moyen et haut). Les calculs d'agrégats pourraient être utilisés pour calibrer l'évolution des variables internes introduites dans ce modèle ainsi que les poids respectifs des sous phases.
- Généraliser la procédure précédente en se dirigeant vers une modélisation polycristalline stochastique dans laquelle la règle de changement d'échelle ne serait plus déterministe mais distribuée de façon probabiliste avec une loi d'évolution qui reste à déterminer. Les calculs d'agrégats pourraient être un guide pour le développement de ce type de méthode.

L'implémentation des mécanismes de déformation sous irradiation neutronique dans un formalisme micromécanique constitue une des perspectives importantes de ce travail. Le dernier chapitre de ce manuscrit propose une piste de modélisation. Comme souligné à la fin de ce dernier chapitre, les difficultés associées à l'expérimentation sous irradiation constitue le facteur limitant du développement d'une telle modélisation. De fait, les calculs à l'échelle inférieure tels que la dynamique des dislocations, les calculs de dynamique moléculaire ou encore les calculs *ab initio* peuvent nous apporter des informations essentielles sur les mécanismes élémentaires.

# Annexe A

## Problème de l'inclusion d'Eshelby

### A.1 Tenseur d'Eshelby d'une inclusion ellipsoïdale

Cette annexe est largement inspirée des travaux publiés dans [Mura 87]. On souhaite estimer le champ de déformation  $\underline{\underline{\varepsilon}}^*$  dans une inclusion ellipsoïdale plongée dans un milieu infini homogène et isotrope. On se place dans un cadre où le comportement est linéaire et élastique. Eshelby a montré [Eshelby 57] dans ce cas que les champs mécaniques étaient uniformes dans l'inclusion.

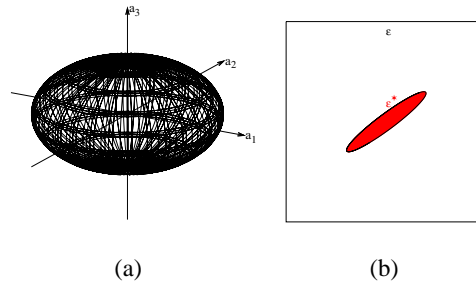


FIG. A.1 – (a) Inclusion ellipsoïdale dans son repère principal et (b) problème d'Eshelby

On note  $a_1$ ,  $a_2$  et  $a_3$  les rayons principaux de l'ellipsoïde tels que  $a_1 \geq a_2 \geq a_3$  et  $\mathcal{R}_p = \{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$  le repère propre associé.

Le calcul du tenseur d'Eshelby fait apparaître des intégrales elliptiques de première,  $F(\theta, k)$ , et seconde espèce,  $E(\theta, k)$ , qu'il est nécessaire d'intégrer numériquement (pas d'expression analytique...) :

$$F(\theta, k) = \int_0^\theta \frac{1}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \omega}} d\omega \quad \text{et} \quad E(\theta, k) = \int_0^\theta \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \omega} d\omega \quad (\text{A.1})$$

Avec  $k$  et  $\theta$  le module et le paramètre de ces intégrales elliptiques qui s'expriment en fonction des rayons de l'ellipsoïde suivant les relations A.2.

$$k = \sqrt{\frac{a_1^2 - a_2^2}{a_1^2 - a_3^2}} \quad \text{et} \quad \theta = \sin^{-1} \left( \sqrt{1 - \frac{a_3^2}{a_1^2}} \right) \quad (\text{A.2})$$

On peut alors calculer les grandeurs  $I_1$  et  $I_3$  qui en découlent :

$$\begin{cases} I_1 &= \frac{4\pi a_1 a_2 a_3}{(a_1^2 - a_2^2)\sqrt{a_1^2 - a_3^2}} \{F(\theta, k) - E(\theta, k)\} \\ I_3 &= \frac{4\pi a_1 a_2 a_3}{(a_2^2 - a_3^2)\sqrt{a_1^2 - a_3^2}} \left\{ \frac{a_2 \sqrt{(a_1^2 - a_3^2)}}{a_1 a_3} - E(\theta, k) \right\} \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

Et en déduire les valeurs des  $I_{ij}$  à partir des relations A.4.

$$\begin{cases} I_1 + I_2 + I_3 &= 4\pi \\ 3I_{11} + I_{12} + I_{13} &= \frac{4\pi}{a_1^2} \\ 3a_1^2 I_{11} + a_2^2 I_{12} + a_3^2 I_{13} &= 3I_1 \\ I_{12} &= \frac{I_2 - I_1}{a_1^2 - a_2^2} \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

Les composantes du tenseur d'Eshelby s'expriment à partir les relations suivantes :

$$\begin{cases} \mathbb{S}_{iii}^E = \frac{3}{8\pi(1-\nu)} a_i^2 I_{ii} + \frac{1-2\nu}{8\pi(1-\nu)} I_i \\ \mathbb{S}_{iijj}^E = \frac{1}{8\pi(1-\nu)} a_j^2 I_{ij} + \frac{1-2\nu}{8\pi(1-\nu)} I_i \\ \mathbb{S}_{ijij}^E = \frac{a_i^2 + a_j^2}{16\pi(1-\nu)} I_{ij} + \frac{1-2\nu}{16\pi(1-\nu)} (I_i + I_j) \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

Le tenseur d'Eshelby s'écrit alors dans les axes de l'ellipsoïde et avec la convention de Cowin :

$$\mathbb{S}^E = \begin{pmatrix} \mathbb{S}_{1111}^E & \mathbb{S}_{1122}^E & \mathbb{S}_{1133}^E & 0 & 0 & 0 \\ \mathbb{S}_{2211}^E & \mathbb{S}_{2222}^E & \mathbb{S}_{2233}^E & 0 & 0 & 0 \\ \mathbb{S}_{3311}^E & \mathbb{S}_{3322}^E & \mathbb{S}_{3333}^E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\mathbb{S}_{2323}^E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mathbb{S}_{1313}^E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mathbb{S}_{1212}^E \end{pmatrix}_{\mathcal{R}_p} \quad (\text{A.6})$$

## A.2 Champ de contrainte dans l'inclusion

On souhaite vérifier les résultats de la démarche analytique d'Eshelby par une approche EF. Pour cela, on va calculer le comportement d'une inclusion ellipsoïdale

### A.3 Approche ellipsoïdale de l'effet de forme en non linéaire

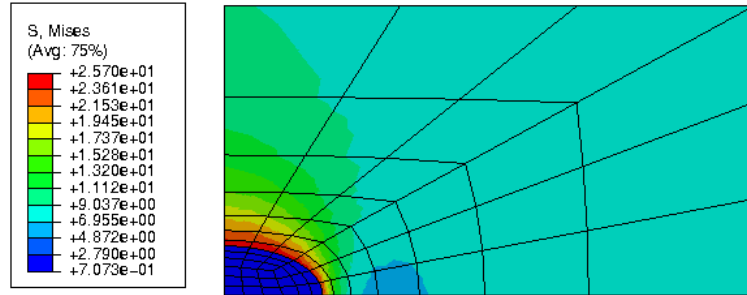
---

plongée dans une matrice. Les calculs sont réalisés pour deux rapports d'élancement  $a_3/a_2 = 5$  et  $1/5$  de l'inclusion. On impose sur le contour un champ de déplacement homogène et on suppose que le contour est suffisamment éloigné pour le considérer à l'infini. Les calculs sont réalisés avec une interpolation quadratique.

On peut montrer que ce problème se ramène au problème d'Eshelby et que l'on a la relation A.7.

$$\underline{\underline{\sigma}} = \mathbb{C}_M [\mathbb{I} + \mathbb{S}^E \mathbb{C}_M^{-1} (\mathbb{C}_M - \mathbb{C}_I)]^{-1} \underline{\underline{E}} \quad (\text{A.7})$$

FIG. A.2 – Homogénéité du champ de déformation dans une inclusion ellipsoïdale



On retrouve par le calcul que le champ de déformation est homogène dans l'inclusion ellipsoïdale et que celui-ci ne dépend que du coefficient de Poisson de la matrice et de la sollicitation imposée au contour.

### A.3 Approche ellipsoïdale de l'effet de forme en non linéaire

On considère que le tenseur d'Eshelby  $\mathbb{S}^E$  d'une inclusion polyédrique donnée (qui n'a pas d'expression théorique) peut être assimilé à celui de la forme ellipsoïdale la plus approchante au sens de l'inertie. Pour le calcul effectif du tenseur d'Eshelby d'une inclusion ellipsoïdale quelconque, on se reportera à l'annexe A. Dans les règles de changement d'échelle, on peut prendre en compte cette forme ellipsoïdale en introduisant le tenseur  $\mathbb{S}^E$  dans le calcul de la contrainte d'incompatibilité de déformation et l'écrire sous la forme A.8.

$$\underline{\underline{X}} = \mathbb{C}(\mathbb{I} - \mathbb{S}^E)(\underline{\underline{B}} - \underline{\underline{\beta}}_g) \quad (\text{A.8})$$

Où  $\mathbb{I}$  est le tenseur identité et  $\mathbb{C}$  est le tenseur des rigidités.

Sur la figure III.15(b), on compare la réponse du modèle en  $\beta$  aux résultats EF en prenant en compte la forme du grain via son tenseur d'Eshelby. La prise en compte d'une forme différente d'une forme sphérique dans le modèle polycristallin permet donc de



développer des effets de trace. Ce résultat conforte donc le fait que l'on puisse attribuer ces effets de trace à la forme des grains. Malheureusement, l'approche ellipsoïdale d'une forme polyédrique est bien trop simpliste pour en décrire sa complexité et on ne parvient pas à capter les effets de trace estimés avec  $p(\varphi)$  par cette approche.

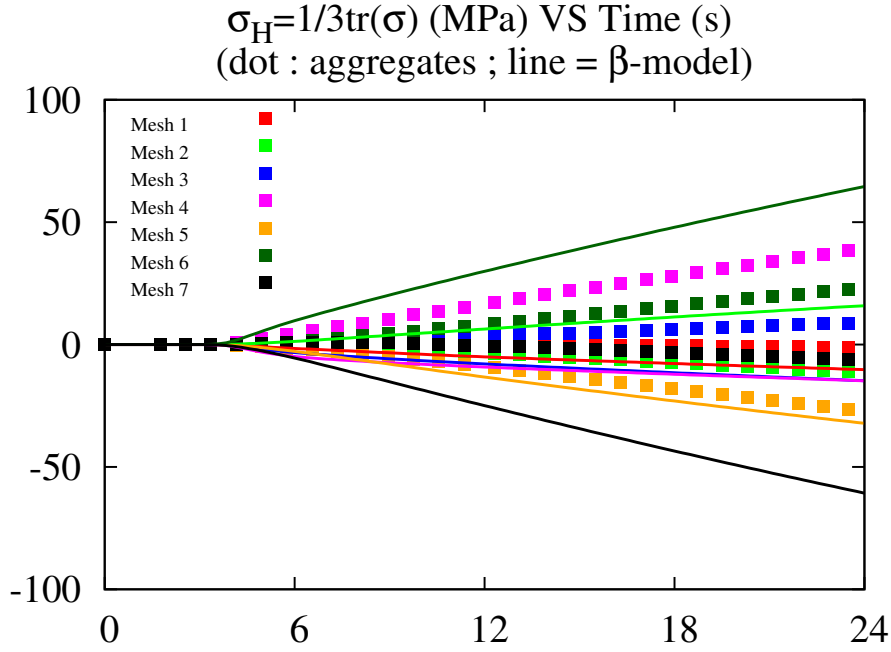


FIG. A.3 – Approche ellipsoïdale de l'effet de trace du à la forme polyédrique des grains

# Annexe B

---

## Comportement de l'estimateur $p(\varphi)$ dans un milieu élastique

---

Dans cette annexe, on souhaite “démontrer” que l'estimateur statistique de la réponse mécanique moyenne d'une phase  $\varphi$ , proposé dans le chapitre III permet de retrouver la solution d'un problème d'élasticité fournie par le modèle auto-cohérent. On se place donc dans un cadre où cette solution existe en prenant le cas d'un polycristal isotrope constitué de grains équiaxes à symétrie cubique.

### B.1 Description du problème théorique

On considère le problème d'une inclusion ellipsoïdale avec un comportement élastique (celui d'un monocristal de cuivre) plongée dans un milieu homogène, infini et isotrope qui correspond au comportement effectif du polycristal isotrope associé. On applique une déformation homogène  $E$  à l'infini et on veut connaître l'état de contrainte dans l'inclusion.

#### B.1.1 Comportement effectif du polycristal

Le comportement élastique d'un cristal de cuivre est caractérisé par 3 modules d'élasticité distincts  $\mathbb{C}_{1111} = 168.4$  GPa,  $\mathbb{C}_{1212} = 121.4$  GPa et  $\mathbb{C}_{4444} = 75.39$  GPa. On peut relier ces modules d'élasticité au coefficient de compressibilité,  $k$ , et aux modules de cisaillement dans le plan,  $\mu_a$ , et hors plan,  $\mu_b$ , à l'aide des relations B.1.

$$\begin{cases} 2\mu_a &= \mathbb{C}_{1111} - \mathbb{C}_{1212} \\ 2\mu_b &= \mathbb{C}_{4444} \\ 3k &= \mathbb{C}_{1111} + 2\mathbb{C}_{1212} \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

On peut alors écrire le tenseur d'élasticité sous la forme :

$$\mathbb{C} = 3k\mathbb{K} + 2\mu_a\mathbb{J}^a + 2\mu_b\mathbb{J}^b \quad (\text{B.2})$$

avec  $\mathbb{K}$ ,  $\mathbb{J}^a$  et  $\mathbb{J}^b$  les projecteurs qui extraient respectivement la partie sphérique d'un tenseur d'ordre 2, les cisaillements hors axes (*i.e.* les cisaillements pur désorientés de 45 ° par aux axes de la symétrie cubique et les cisaillements dans les axes du cube.

On peut montrer que le module de cisaillement effectif,  $\mu_{AC}$ , du polycristal isotrope issue de l'estimation auto-cohérente vérifie l'équation du troisième degrés B.3 [Bornert 01a, Bornert 01b].

$$8\mu_{AC}^3 + (9k + 4\mu_a)\mu_{AC}^2 - 3\mu_b(k + 4\mu_a)\mu_{AC} - 6k\mu_a\mu_b = 0 \quad (\text{B.3})$$

Pour le module de compressibilité effectif,  $k_{AC}$ , on peut facilement montrer que les bornes de Voigt et Reuss sont confondues. On a donc une estimation exacte de  $k_{AC}$ . On pouvait s'attendre à ce résultat puisque le comportement élastique d'un cristal de symétrie cubique présente une compressibilité isotrope. Le matériau est donc un matériau homogène pour une sollicitation sphérique. Finalement, on résout B.3 par une méthode itérative du point fixe et on trouve les modules effectifs suivants :  $E^{AC} = 129.35$  GPa et  $\nu^{AC} = 0.3427$ .

### B.1.2 Contraintes dans l'inclusion

La relation de localisation donnant la contrainte au sein de l'inclusion,  $\underline{\underline{\sigma}}_I$  en fonction de la contrainte à l'infini  $\underline{\underline{\sigma}}_0$  s'écrit :

$$\underline{\underline{\sigma}}_I = (\mathbb{S}^I + \mathbb{S}^*)^{-1} : (\tilde{\mathbb{S}} + \mathbb{S}^*) : \underline{\underline{\sigma}}_0 = \mathbb{B}^I : \underline{\underline{\sigma}}_0 \quad (\text{B.4})$$

Où  $\mathbb{S}^I$  est le tenseur des souplesses de l'inclusion,  $\mathbb{S}^* = \mathbb{C}^{*-1}$  est l'inverse du tenseur d'influence de Hill et  $\tilde{\mathbb{S}}$  est le tenseur des souplesses effectives. Le tenseur d'influence de Hill s'exprime en fonction des modules du milieu infini et de la forme de l'inclusion via le tenseur d'Eshelby (cf annexe A) par la relation B.5 :

$$\mathbb{C}^* = \mathbb{C}^0[\mathbb{S}^{E^{-1}} - \mathbb{I}] \quad (\text{B.5})$$

En tenant compte de la symétrie cubique du comportement local et de l'isotropie macroscopique et en prenant le cas particulier d'une inclusion sphérique, on obtient l'expression suivante pour le tenseur de localisation  $\mathbb{B}^I$  dans les axes du cristal :

$$\mathbb{B}^I = \mathbb{K} + \beta_a\mathbb{J}^a + \beta_b\mathbb{J}^b \quad (\text{B.6})$$

avec :

$$\beta_a = \frac{\mu_a}{\tilde{\mu}} \frac{\tilde{\mu} + \mu^*}{\mu_a + \mu^*} \text{ et } \beta_b = \frac{\mu_b}{\tilde{\mu}} \frac{\tilde{\mu} + \mu^*}{\mu_b + \mu^*} \quad (\text{B.7})$$

Pour l'estimation auto-cohérente, il suffit alors de prendre  $\tilde{\mu} = \mu^{AC}$  et  $\mu^* = \mu^{AC}(9k + 8\mu^{AC})/6(k + 2\mu^{AC})$ . Finalement, on aboutit à une solution analytique dans le cas d'une sphère et à une solution numérique dans le cas d'une inclusion ellipsoïdale.

## B.2 Convergence statistique de l'estimateur $p$

On représente sur les graphiques de la figure B.1 les courbes de convergence et de vitesse de convergence de l'estimation du comportement obtenue à l'aide de  $p(\varphi)$  pour un essai de traction isochore pour les composantes  $\Sigma_{11}$ ,  $\Sigma_{33}$  et  $\Sigma_{12}$  du tenseur des contraintes. Les calculs étant rapides comparés aux calculs réalisés en non linéaire, plus de 1000 réalisations ont été calculées en modifiant pour chaque réalisation la géométrie de l'agrégat. Comme on peut le constater, l'estimation EF permet de retrouver la solution théorique de l'inclusion élastique cubique de forme sphérique plongée dans un MHE isotrope développée dans la partie précédente.

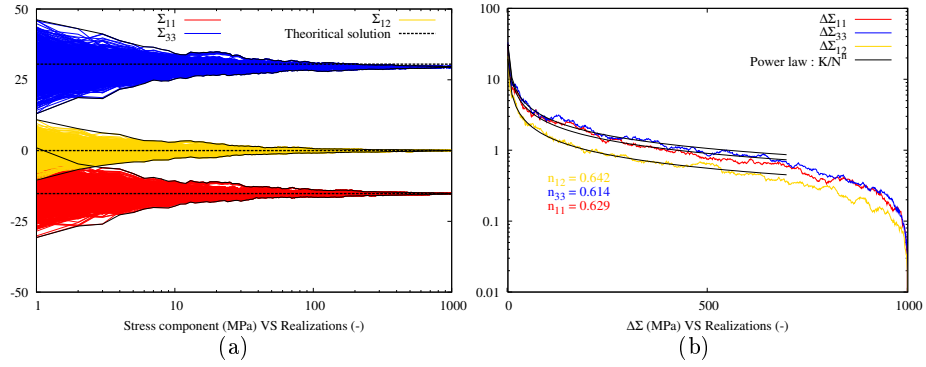


FIG. B.1 – (a) Convergence et (b) vitesse de convergence de l'estimateur  $p(\varphi)$  sur la solution théorique



# Annexe C

---

## Les contraintes résiduelles d'origine thermique

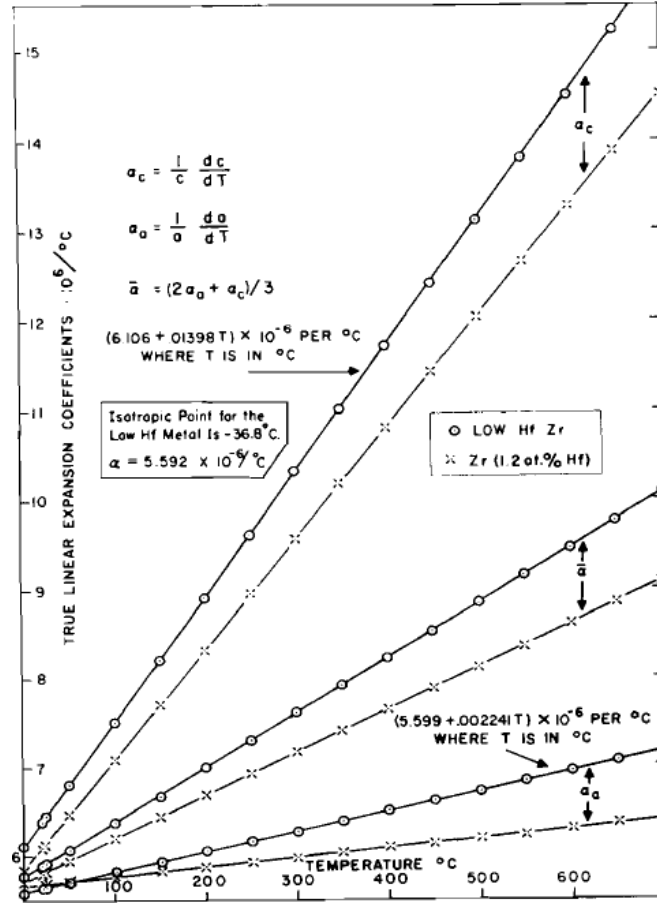
---

On sait que les contraintes résiduelles d'origine thermique peuvent avoir un impact important sur le comportement mécanique du polycristal. Dans les alliages de zirconium particulièrement, Gloaguen a étudié de façon détaillée ces contraintes résiduelles tant au niveau de la caractérisation expérimentale par diffraction RX qu'au niveau de la modélisation par des modèles auto-cohérents [Gloaguen 02, Gloaguen 07]. Il montre entre autres que la prise en compte de ces contraintes résiduelles est nécessaire si l'on souhaite reproduire la différence de limite d'élasticité du polycristal à température ambiante entre les directions transverses et longitudinales d'une tôle laminée (voir graphique C.1(b)).

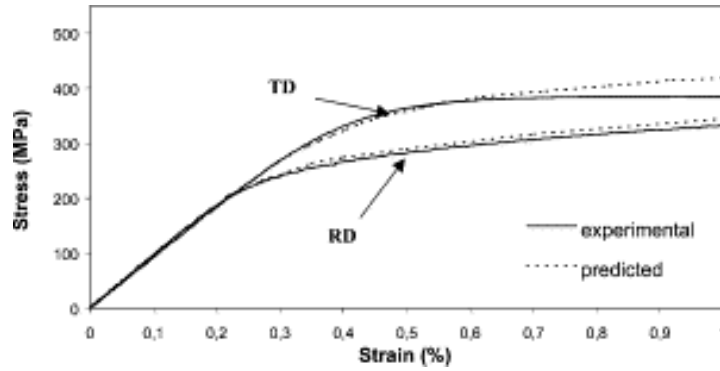
Lorsque les tubes en alliage de zirconium sont mis en forme, ils subissent après chaque passe de laminage un traitement thermique permettant de relaxer une part importante des contraintes internes générées au cours du processus de mise en forme. Après la 3<sup>ème</sup> et dernière passe de laminage, le produit subit un traitement thermique final dont le but est de contrôler l'état métallurgique final du produit commercialisé. Le traitement de recristallisation consiste en un recuit à 580°C pendant 5 heures. On fait l'hypothèse qu'à la fin de ce traitement thermique, la contrainte est nulle en tout point du polycristal.

### C.1 Estimation des contraintes résiduelles

Lors du refroidissement lent jusqu'à température ambiante du polycristal, les différents grains constitutifs vont se contracter différemment en fonction de leur orientation cristalline à cause de l'anisotropie de dilatation thermique des monocristaux hexagonaux et des contraintes d'incompatibilités de déformation entre grains d'origine thermoélastique vont apparaître dans le polycristal. Comme on peut l'observer sur la figure C.1(a),



(a)



(b)

FIG. C.1 – (a) Mise en évidence expérimentale de l'anisotropie thermoélastique de la structure hexagonale [Russel 54] et (b) impact des contraintes résiduelles sur l'anisotropie plastique à froid [Gloaguen 02].

à 400°C, un monocristal de zirconium se dilate deux fois plus suivant la direction  $c$  que dans le plan basal ce qui constitue une anisotropie relativement forte. On considère que les niveaux de contraintes générées lors du refroidissement sont suffisamment faibles pour ne pas provoquer de microplasticité dans le polycristal (hypothèse que nous assumons au premier ordre mais qui est certainement “fausse” si l’on souhaitait être plus fin). On se place donc dans un cadre purement thermoélastique où il est équivalent de faire un refroidissement à l’ambiante puis un chauffage à la température à laquelle on souhaite estimer le niveau des contraintes résiduelles ou bien un refroidissement direct jusqu’à cette température.

Nous souhaitons mettre à profit l’expertise développée sur les agrégats polycristallins afin d’utiliser l’estimateur proposé dans la partie précédente pour quantifier les contraintes résiduelles d’origine thermoélastiques. L’objectif est de produire une solution numérique et de la comparer à des modèles analytiques simples issus d’hypothèses fortes. Les résultats de cette étude seront réutilisés par la suite dans le chapitre concernant la modélisation micromécanique afin de quantifier l’influence de ces contraintes résiduelles sur l’anisotropie viscoplastique en fluage des alliages de zirconium.

### C.1.1 Estimation EF des contraintes résiduelles

On se propose d’étudier les contraintes thermoélastiques à 400°C sur une texture réduite à 226 orientations représentative d’une texture à lunettes typique d’un alliage de zirconium recristallisé. L’idée est la suivante : on souhaite bénéficier du temps de calcul raisonnable associé à un comportement thermoélastique linéaire pour calculer l’état de contrainte résiduelle moyen dans les 226 phases de la texture réduite. Pour chaque phase, caractérisée par son orientation cristallographique, on fige l’orientation du grain central et on calcule un ensemble de 50 réalisations statistiques pour être représentatif de la texture cristallographique cible. On utilise des agrégats de 343 grains dont le centroïde du grain central est confondu avec le centre du cube et on impose un refroidissement de -180°C du polycristal (de 580°C à 400°C). On ne se préoccupe pas de l’effet de forme dans cette partie et on considère un unique tirage de Voronoï pour l’ensemble des calculs réalisés.

### C.1.2 Estimation par un modèle de comportement analytique

Si l’on considère une élasticité isotrope ( $\mathbb{C}_{iso}$ ) et que l’on se place dans le cadre de la thermoélasticité, on peut écrire l’état de contrainte dans une phase cristalline  $\varphi$  sous la forme :

$$\underline{\underline{\sigma}}_{\varphi} = \mathbb{C}_{iso} \left[ \underline{\underline{\varepsilon}}_{\varphi} - \underline{\underline{\alpha}}_{\varphi} (T - T_0) \right] \quad (\text{C.1})$$

S’agissant d’un problème de dilatation libre, par définition, les contraintes résiduelles sont autoéquilibrées dans un polycristal non sollicité mécaniquement et pris à température uniforme. On peut donc écrire que la moyenne des contraintes microscopiques sur tout le polycristal doit être nulle.



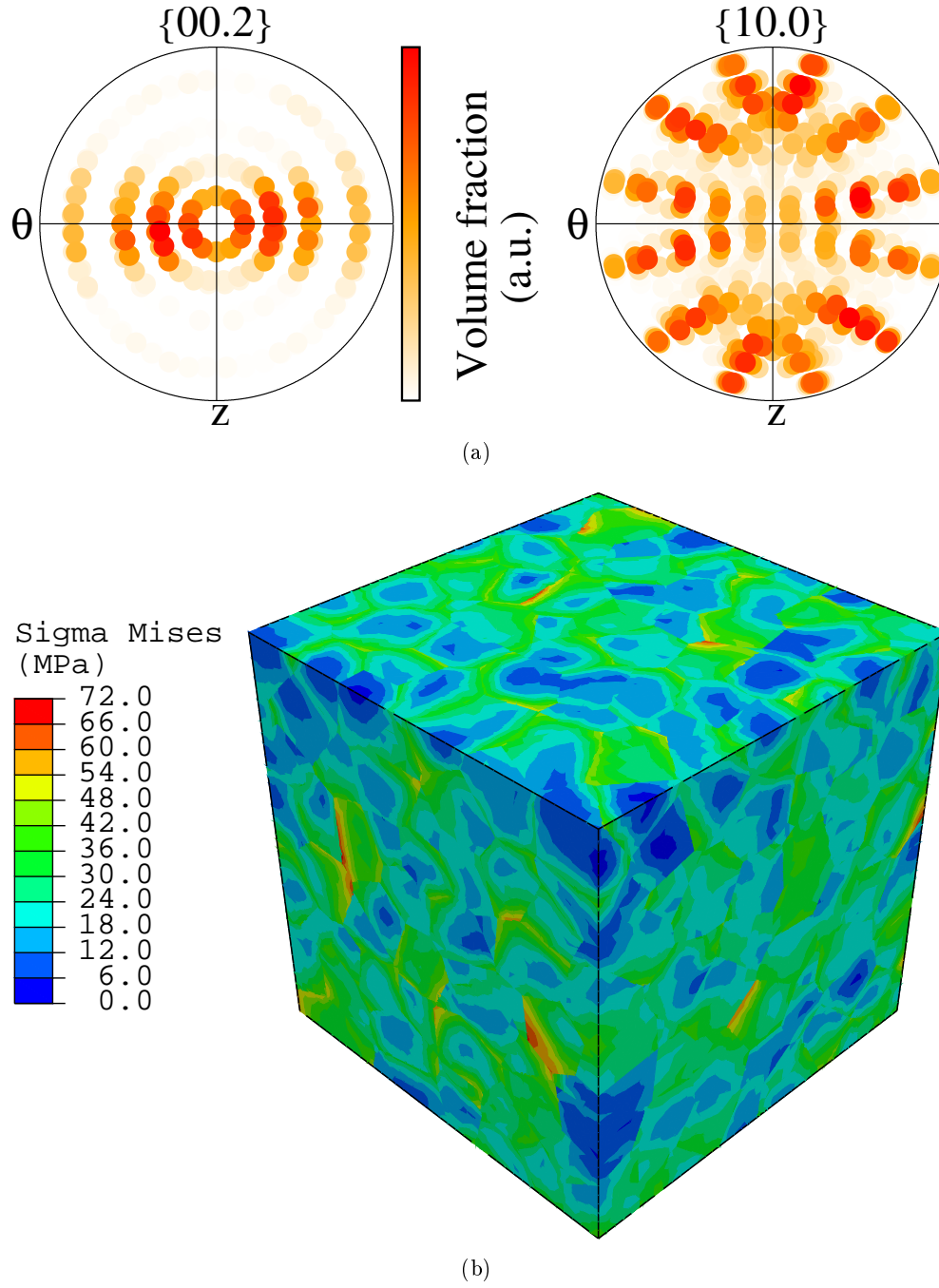


FIG. C.2 – (a) Figures de pôles de la texture réduite à 226 orientations et (b) champ des contraintes résiduelles de Von Mises obtenues par un refroidissement de -180K du polycristal.

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \left\langle \underline{\underline{\sigma}}_{\varphi} \right\rangle_G = 0 \quad (\text{C.2})$$

On pose  $\alpha = \alpha_a$ ,  $\Delta\alpha = \alpha_c - \alpha_a$  et  $\Delta T = T - T_0$ . Le tenseur de dilatation thermique peut alors se décomposer sous la forme suivante :

$$\underline{\underline{\alpha}}_{\varphi} = \alpha \underline{\underline{I}} + \Delta\alpha [\underline{\underline{c}}_{\varphi} \otimes \underline{\underline{c}}_{\varphi}] \quad (\text{C.3})$$

Le refroidissement d'un polycristal engendre une déformation macroscopique réversible due à la dilatation thermique qui peut être évaluée par la relation suivante en introduisant de nouveau la matrice de Kearns  $\underline{\underline{K}}_e$ .

$$\underline{\underline{E}} = \left\langle \underline{\underline{\varepsilon}}_{\varphi} \right\rangle_G = \left[ \alpha \underline{\underline{I}} + \Delta\alpha \underline{\underline{K}}_e \right] \Delta T \text{ avec : } \underline{\underline{K}}_e = \left\langle \underline{\underline{c}}_{\varphi} \otimes \underline{\underline{c}}_{\varphi} \right\rangle_G \quad (\text{C.4})$$

Et l'état de contrainte résiduel vaut alors :

$$\underline{\underline{\sigma}}_{\varphi} = \mathbb{C}_{iso} \left[ \Delta\alpha \left( \underline{\underline{K}}_e - \underline{\underline{c}}_{\varphi} \otimes \underline{\underline{c}}_{\varphi} \right) \right] \Delta T \quad (\text{C.5})$$

Nous pouvons ici donner un ordre de grandeur des contraintes résiduelle générées dans le cadre de ce modèle. On considère un bicristal constitué de 2 phases cristallines (correspondant aux 2 orientations les plus fréquentes dans les alliages de zirconium) telle que  $\psi = (\vec{r}, \vec{c}) = \pm 30^\circ$ . De plus, on prend  $E = 74\text{GPa}$ ,  $\nu = 0,37$ ,  $\Delta\alpha = 4,2 \cdot 10^{-6} K^{-1}$  et  $\Delta T = -180K$ . On trouve alors que le refroidissement d'un bicristal provoque uniquement l'apparition de cisaillement  $r\theta$  avec  $\sigma_{r\theta} \sim 18\text{MPa}$ .

### C.1.3 Résultats

Dans le cas réel d'un polycristal, l'état de contrainte résiduel sera plus complexe à cause de la distribution des orientations cristallines. Dans le but d'évaluer cet état de contrainte résiduel caractéristique des propriétés thermoélastiques et de la texture d'un matériau, ce modèle de comportement a été intégré dans SiDoLo et les résultats fournis par ce modèle sont comparés aux résultats obtenus sur les agrégats polycristallins.

## C.2 Implémentation dans le modèle polycristallin

Par manque de temps, nous n'avons pas pu étudier l'impact des contraintes résiduelles d'origine thermoélastique sur le comportement en fluage et notamment son influence sur l'anisotropie. Nous proposons tout de même un formalisme simple permettant d'introduire les contraintes résiduelles dans le modèle polycristallin en affectant pour chaque phase cristallographique un état de contrainte initial correspondant à l'état de contrainte résiduelle obtenu par le modèle de Voigt. Nous obtiendrons ainsi une "borne" supérieure des effets des contraintes résiduelles sur le comportement macroscopique. Nous supposons que les contraintes résiduelles d'une phase sont relaxées lorsque le polycristal s'écoule plastiquement. Nous proposons une décroissance exponentielle des contraintes résiduelles avec la déformation plastique cumulée de la phase. L'état de contrainte dans une phase  $\varphi$  s'obtient alors par la relation C.6.

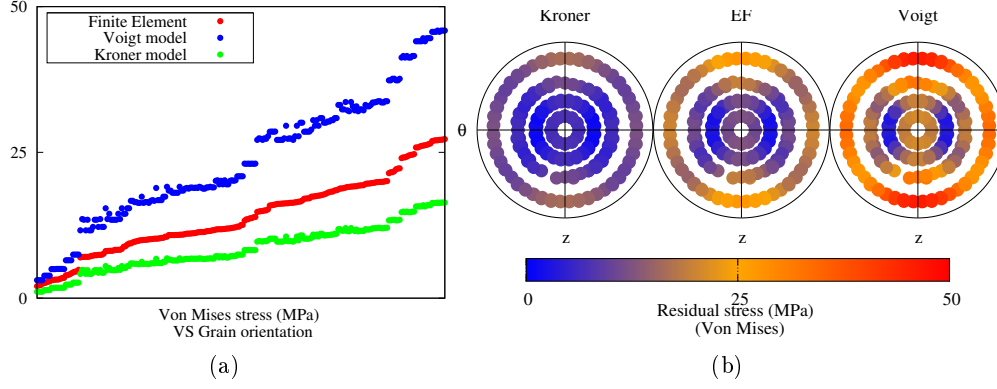


FIG. C.3 – Niveau des contraintes résiduelles thermoélastiques obtenues par différents modèles à 400°C (Kröner, EF et Voigt) : (a) Visualisation par intensité triée en fonction de l'orientation et (b) projection stéréographique directe 0002.

$$\underline{\underline{\sigma}}_{\varphi} = \underline{\underline{\sigma}}_{\varphi}^0 \exp(-Kp_{\varphi}) + \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu(1 - \beta)(\underline{\underline{B}} - \underline{\underline{\beta}}_{\varphi}) \quad (\text{C.6})$$

Notons que cette équation ne permet qu'une estimation de l'effet des contraintes résiduelles sur une première sollicitation ultérieure dans le domaine plastique, après calibration du coefficient K du terme exponentiel.

# Annexe D

---

## Effet du voisinage sur le comportement d'un grain

---

L'objectif de cette annexe est d'analyser l'effet du voisinage d'un grain sur sa réponse moyenne à une sollicitation macroscopique dans le but de mettre en évidence que l'intensité de l'interaction mécanique entre deux grains est une fonction décroissante de la distance qui les séparent et que la première couronne de voisins a un rôle prédominant sur sa réponse moyenne.

### D.1 Champs mécaniques

Dans le but de se faire une première idée de l'impact du voisinage d'un grain sur sa réponse, nous analysons dans cette partie certains champs mécaniques (Contrainte équivalente, déformation plastique cumulée et densité de dislocations prismatiques) obtenus suite à un calcul d'agrégat en traction isochore pour un tirage isotrope des orientations dans un polycristal contenant 729 grains. Pour des raisons d'effet de bords notamment, les résultats du calcul ne sont analysés que dans les deux premières couronnes et dans le grain central de l'agrégat. La figure D.1(a) fournit une visualisation de l'orientation des grains au travers de leur angle  $\Phi$  entre la direction de sollicitation et l'axe  $\underline{c}$  grâce à une cartographie de type "EBSD" introduite précédemment.

On note bien évidemment qu'il y a un bon accord entre le champ de déformation plastique cumulée et le champ de densité de dislocations puisque dans le modèle de plasticité cristalline, c'est l'activation des systèmes de glissement qui est à l'origine de la plasticité dans le grain. On note également que les grains les moins déformés (plastiquement) sont les grains les plus contraints puisqu'ils n'ont pas (ou peu) dissipé leur énergie par viscoplasticité. Enfin si l'on tente d'établir une corrélation entre l'orientation d'un grain et son comportement EVP, on se heurte à quelques difficultés... Prenons le

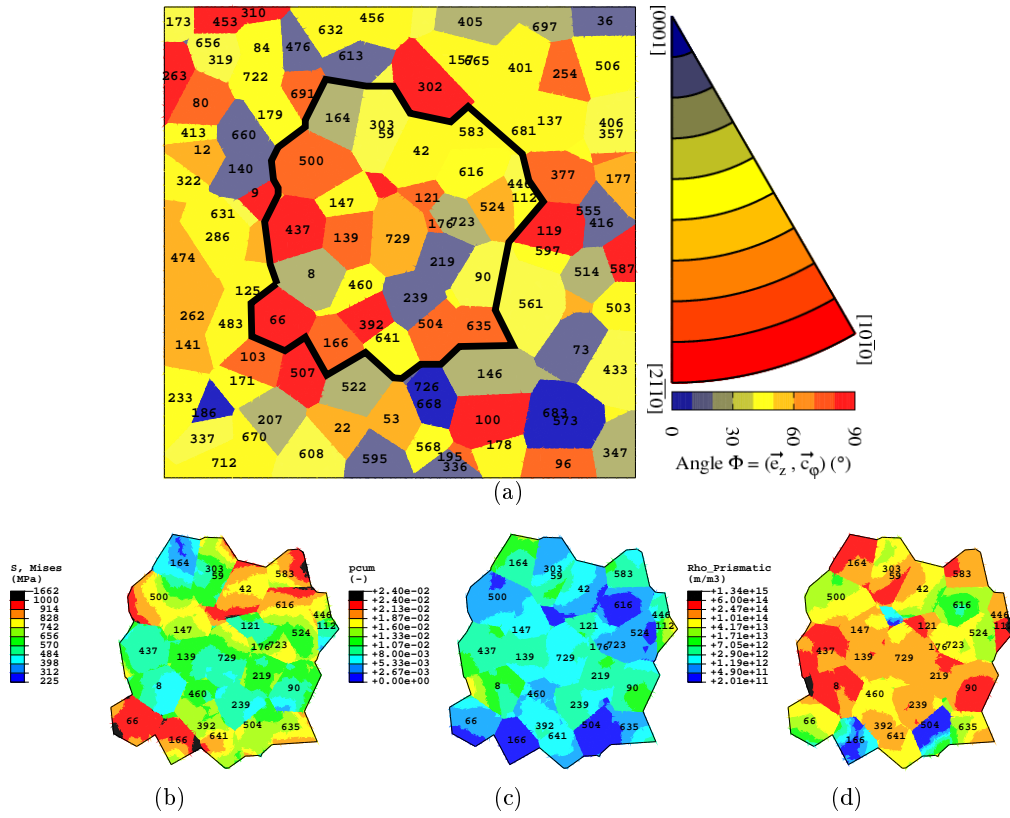


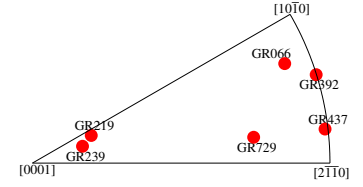
FIG. D.1 – (a) Orientations cristallographiques des grains et visualisation en coupe des (c) champs de contraintes équivalente de von Mises, (d) de déformation plastique cumulée et (e) de densité de dislocations prismatique moyenne (moyenne sur les 3 systèmes) dans les grains du voisinage d'ordre 1 et 2 et dans le grain central.

## D.2 Impact du voisinage sur la convergence de l'estimation

cas du grain 66, il est favorablement orienté pour le glissement prismatique ( $\Phi = 82^\circ$ ) et pourtant il plastifie très peu par rapport à d'autres grains. C'est donc que le voisinage qui l'entoure le contraint à ne pas se déformer. D'après la cartographie des orientations, ce grain est en partie entouré par des grains à faible désorientation (par rapport à  $\underline{c}$ ) ce qui pourrait expliquer ce résultat.

Nous détaillons dans le tableau D.1 et sur les figures du graphe D.2 les résultats obtenus pour des grains à fort angle  $\Phi$  (grains 66, 392 et 437) et à faible angle  $\Phi$  (grains 219 et 239) et également pour le grain central (grain 729). Les grandeurs moyennes sont relatives aux moyennes spatiales dans le grain considéré.

| Grain | $\Phi$<br>( $^\circ$ ) | $F_P$<br>(-) | $\langle \underline{\Sigma}^{eq} \rangle$<br>(MPa) | $\langle p^{cum} \rangle$<br>(-) | $\langle \rho^P \rangle$<br>(m/m <sup>3</sup> ) |
|-------|------------------------|--------------|--|----------------------------------|---|
| 729   | 67,4                   | 0,441        | 583  | $6,02 \cdot 10^{-03}$            | $3,17 \cdot 10^{+13}$                           |
| 66    | 82,0                   | 0,483        | 918  | $3,79 \cdot 10^{-03}$            | $1,58 \cdot 10^{+13}$                           |
| 392   | 89,9                   | 0,498        | 725  | $6,14 \cdot 10^{-03}$            | $3,06 \cdot 10^{+13}$                           |
| 437   | 89,1                   | 0,479        | 545  | $9,58 \cdot 10^{-03}$            | $8,15 \cdot 10^{+13}$                           |
| 219   | 19,7                   | 0,008        | 618  | $9,52 \cdot 10^{-03}$            | $7,44 \cdot 10^{+13}$                           |
| 239   | 16,0                   | 0,006        | 478  | $7,91 \cdot 10^{-03}$            | $5,95 \cdot 10^{+13}$                           |



TAB. D.1 – Relation orientation / comportement EVP pour 6 grains choisis dans D.1 : mise en évidence d'un effet d'environnement (On note  $F_P$  le facteur de Schmid prismatique,  $\langle \underline{\Sigma}^{eq} \rangle$  la contrainte équivalente moyenne,  $\langle p^{cum} \rangle$  la déformation plastique cumulée moyenne et  $\langle \rho^P \rangle$  la densité de dislocations prismatiques moyenne)

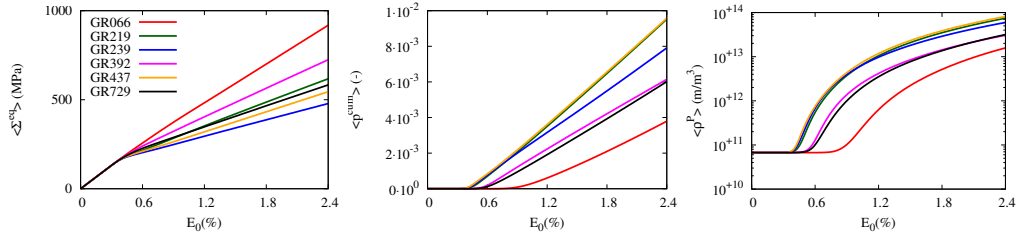


FIG. D.2 – Evolution dans le temps de différentes grandeurs mécaniques moyennes par grain : Contrainte équivalente, Déformation plastique cumulée et densité de dislocations prismatiques moyenne.

## D.2 Impact du voisinage sur la convergence de l'estimation

On souhaite estimer l'impact du voisinage sur la convergence de l'estimation. Pour cela, des calculs en traction isochore ont été réalisés sur des agrégats contenant 512 grains et pour deux phases dans un milieu isotrope. Dans un premier temps, 250 réalisations ont été calculées en utilisant le processus d'estimation décrit dans le chapitre

III. Une fois ces calculs réalisés, on détecte la réalisation  $\#i$  qui est la plus proche de la moyenne des 250 réalisations (au sens des écarts cumulés sur les contraintes et déformations) et on enregistre les orientations cristallines des premiers voisins du grain central de la réalisation  $\#i$ . La seconde série de calculs qui a été entreprise consiste à prendre les orientations de la première couronne de voisins identiques à celle de la réalisation  $\#i$  et à figer ces orientations dans le processus d'estimation. 150 calculs ont été réalisés en utilisant cette technique et on représente sur les graphiques de la figure D.3(a) les courbes de convergence de l'estimation obtenues dans les deux cas. On observe sur la figure D.3(b) que la vitesse de convergence de l'estimation augmente lorsque la distribution des orientations dans le proche voisinage du grain central est figée au cours du processus d'estimation. Comme les orientations des premiers voisins constituent la seule variabilité entre les 2 estimations, cette accélération de convergence est à relier au fait que les voisins directs du grain central ont une influence plus importante sur son comportement mécanique que les grains plus éloignés. Afin de démontrer ce résultat de manière plus formelle, il faudrait réaliser la même analyse mais cette fois-ci sur le voisinage d'ordre 2 (c'est-à-dire les voisins directs des voisins du grain central). On peut imaginer que cette analyse conduirait à une accélération moins importante de la convergence que l'analyse conduite sur le voisinage d'ordre 1. Face à ce constat, on serait tenté de développer un modèle polycristallin composite à double inclusion où une phase cristallographique serait caractérisée par son orientation et son voisinage. Le problème est que ce type de modélisation conduit à une augmentation très importante du nombre de variables internes et à une impossibilité de les utiliser sur les machines actuelles...

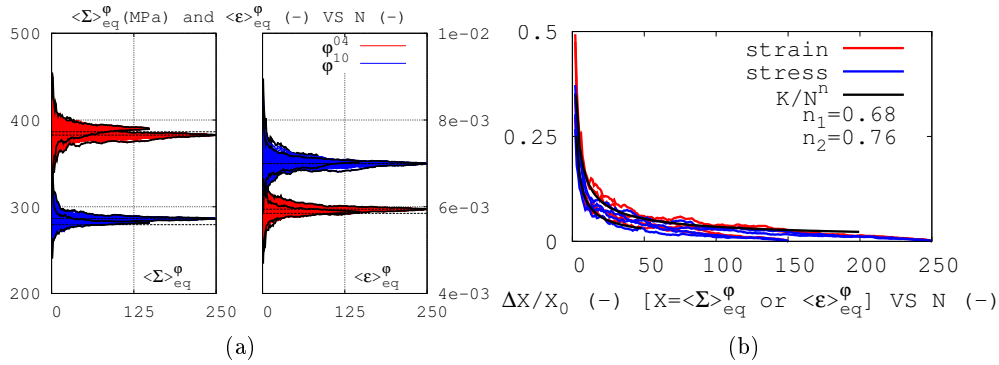


FIG. D.3 – Accélération de la convergence de l'estimation lorsque l'on fige la distribution des orientations dans la première couronne de voisins.

### D.3 Hétérogénéité de comportement au sein d'une même phase

On se pose la question de savoir comment le voisinage direct (premiers voisins) du grain central accommode les incompatibilités de déformation et si il existe une tendance

### D.3 Hétérogénéité de comportement au sein d'une même phase

dans la distribution des orientations de ce voisinage permettant de mieux comprendre la diversité des réponses observées au sein d'une même phase dans l'ensemble des réalisations calculées. Afin d'apporter des éléments de réponses à cette interrogation, des calculs d'agrégats en traction isochore ont été entrepris sur des maillages contenant 729 grains. On calcule un nombre important de réalisations afin de pouvoir en retirer une information statistique pertinente. Dans cette analyse, environ 100 calculs ont été conduits pour deux orientations cristallines différentes ( $\varphi^{04}$  et  $\varphi^{10}$  : cf Tab. III.6) du grain central représentant plusieurs mois de calculs sur des machines bien cadencées... On obtient pour chaque phase cristallographique un comportement mécanique décrit par la moyenne des réalisations. On note sur la figure D.4 une dispersion importante des réalisations autour des valeurs moyennes. Cette dispersion témoigne d'une hétérogénéité de comportement des grains de même orientation plongés dans des environnements différents. On caractérise cette hétérogénéité par la distribution des contraintes équivalentes obtenue en fin d'essai qui est également représentée sur les graphiques de la figure D.4.

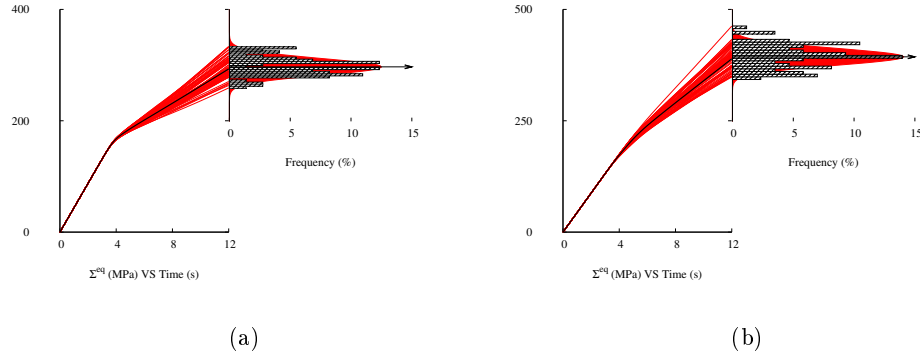


FIG. D.4 – Dispersion de la réponse mécanique autour du comportement moyen pour les phases (a)  $\varphi^{07}$  et (b)  $\varphi^{10}$  et distributions statistiques associées.

Face à cette hétérogénéité intraphase, on peut s'interroger sur le concept de phase cristallographique dans le cadre d'une modélisation polycristalline. En effet, lors du passage de l'ensemble des grains de même orientation au concept de phase, on gomme toute cette diversité de comportement en la remplaçant par la valeur moyenne. Comme discuté dans D.2, une meilleure description du comportement mécanique d'un polycristal pourrait passer par le développement de modèles à double inclusion avec prise en compte de l'effet de voisinage direct sur le comportement des phases cristallographiques.

Ces modèles n'étant pas techniquement envisageables à l'heure actuelle, on peut penser à une autre solution pour remédier au problème. Au lieu de décrire le comportement d'une phase simplement par sa moyenne, on pourrait discrétiser les distributions des contraintes en trois niveaux (un niveau haut, un niveau moyen et un niveau bas)



et proposer une loi d'évolution phénoménologique sur l'écart-type des distributions en se basant sur les résultats fournis par les calculs d'agrégats polycristallins. Le comportement d'une phase serait alors obtenu par une moyenne pondérée par les densités de probabilité des niveaux discrétisés des comportements associés aux trois sous phases. Par manque de temps, cette modélisation n'a pas été développée au cours de cette étude. En revanche, les calculs d'agrégats réalisés sur 729 grains permettent d'alimenter cette discussion.

| Contrainte (MPa) | $\varphi^{07}$ | $\varphi^{10}$ |  |
|------------------|----------------|----------------|--|
| $\Sigma_{min}^B$ | 340            | 260            | $\left\{ \begin{array}{l} B = \{g \in V_1   \Sigma_{min}^B < \bar{\Sigma}_{\alpha_c}^{eq} < \Sigma_{min}^B + \Delta\Sigma\} \\ M = \{g \in V_1   \Sigma_{min}^M < \bar{\Sigma}_{\alpha_c}^{eq} < \Sigma_{min}^M + \Delta\Sigma\} \\ H = \{g \in V_1   \Sigma_{min}^H < \bar{\Sigma}_{\alpha_c}^{eq} < \Sigma_{min}^H + \Delta\Sigma\} \end{array} \right.$ |
| $\Sigma_{min}^M$ | 390            | 300            |  |
| $\Sigma_{min}^H$ | 420            | 350            |  |
| $\Delta\Sigma$   | 20             | 20             |  |

TAB. D.2 – Niveaux de contrainte seuil utilisés pour tracer les figures D.5 et définition des ensembles de grains produisant un niveau de contrainte  $\bar{\Sigma}_{\alpha_c}^{eq}$  bas ( $B$ ), moyen ( $M$ ) et haut ( $H$ ) dans le grain central  $\alpha_c$ .

Dans les calculs illustrés par les graphiques de la figure D.4, pour chaque réalisation, on enregistre les champs de contrainte et de déformation moyens dans le grain central et la première couronne de voisins de ce grain (On note cet ensemble  $V_1$ ) ainsi que l'orientation associée à ces grains. Sur les graphes de la figure D.5, on projette dans le triangle standard la direction de sollicitation macroscopique ( $\underline{e}_z$ ) dans les axes cristallographiques pour tous les premiers voisins et pour toutes les réalisations statistiques en distinguant le niveau de contrainte dans le grain central  $\alpha_c$ .

### D.3 Hétérogénéité de comportement au sein d'une même phase

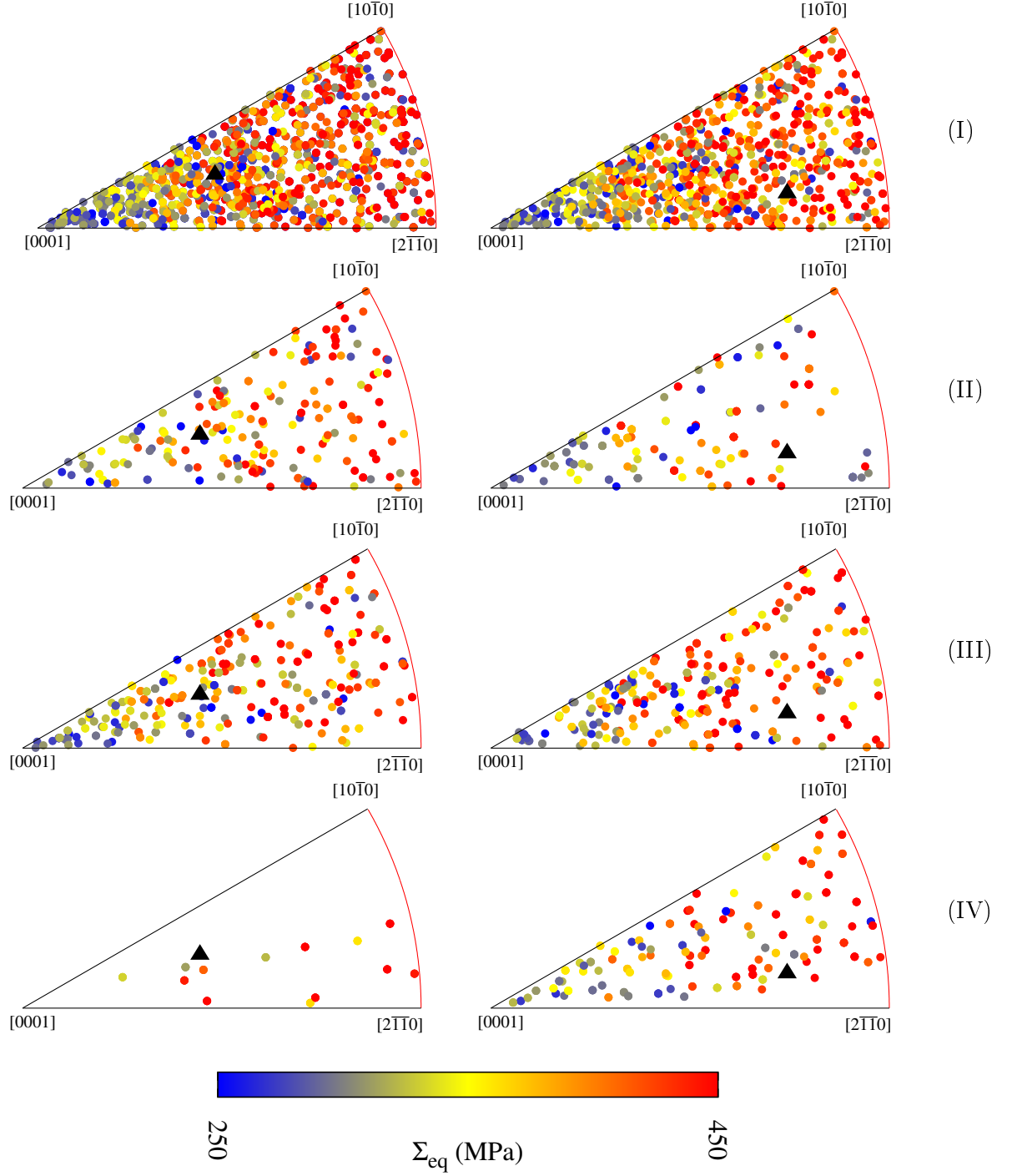


FIG. D.5 – Distribution des orientations des premiers voisins associée à leur niveau de contrainte équivalente pour deux phases cristallines [(gauche)  $\varphi^{10}$  et (droite)  $\varphi^{04}$ ] en fonction du niveau de contrainte dans le grain central (Pas de distinction (I) et niveau bas : ensemble  $B$  (II), moyen : ensemble  $M$  (III) et haut : ensemble  $H$  (IV) [Premiers voisins ( $\bullet$ ), grain central ( $\blacktriangle$ )]).



---

## Références bibliographiques

---

- [Adams 80] B. L. Adams, G. S. Clevinger & J. P. Hirth. *An upper-bound evaluation of interactive creep and growth in textured Zircaloy*. Journal of Nuclear Materials, vol. 90, pages 75–88, 1980.
- [Ashby 72] M.F Ashby. *A first report on deformation-mechanism maps*. Acta Metallurgica, vol. 20, pages 887–89, 1972.
- [Bacon 88] D. J. Bacon. *A review of computer models of point defects in hcp metals*. Journal of Nuclear Materials, vol. 159, pages 176–189, 1988.
- [Bacroix 90] B. Bacroix, O. Brun & T. Chauveau. 1990. ICOTOM9 Ninth International Conference on Texture of Materials.
- [Barbe 01a] F. Barbe, L. Decker, D. Jeulin & G. Cailletaud. *Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 1 : F.E. model*. International Journal of Plasticity, vol. 17, pages 513–536, 2001.
- [Barbe 01b] F. Barbe, S. Forest & G. Cailletaud. *Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 2 : Results*. International Journal of Plasticity, vol. 17, pages 537–563, 2001.
- [Béchade 93] J.L. Béchade. *Texture et écrouissage de tôles en Zircaloy-4 : évolutions en fonction des paramètres de laminage à froid - influence sur le comportement élastique, la dilatation thermique et l'anisotropie plastique*. Thèse de doctorat, Université de Nantes, 1993.
- [Beran 70] M.J. Beran & J.J. McCoy. *The use of strain gradient theory for analysis of random media*. International Journal of Solids and Structures, vol. 6, pages 1267–1275, 1970.
- [Berveiller 79] M. Berveiller & A. Zaoui. *An extension of the self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 26, pages 325–344, 1979.
- [Bishop 51] J.F.W. Bishop & R. Hill. *A theory for the plastic distortion of a polycrystalline aggregate under combined stresses*. Philosophical Magazine, vol. 42, pages 414–427, 1951.

- [Bonneville 79] J. Bonneville & B. Escaig. *Cross-slipping process and the stress-orientation dependence in pure copper*. Acta Metallurgica, vol. 27, pages 1477–1486, 1979.
- [Bonneville 85] J. Bonneville. *Etude des paramètres d'activation du glissement dévié dans le cuivre*. Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, 1985.
- [Bornert 01a] M. Bornert, T. Bretheau & P. Gilormini. Homogénéisation en mécanique des matériaux 1 : matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques. Hermès, 2001.
- [Bornert 01b] M. Bornert, T. Bretheau & P. Gilormini. Homogénéisation en mécanique des matériaux 2 : comportements non linéaires et problèmes ouverts. Hermès, 2001.
- [Brenner 01] R. Brenner. *Influence de la microstructure sur le comportement en fluage thermique d'alliages de zirconium : analyse expérimentale et mise en œuvre de méthodes d'homogénéisation*. Thèse de doctorat, Université Paris XIII, 2001.
- [Bron 04] F. Bron & J. Besson. *A yield function for anisotropic materials - Application to aluminium alloy*. International Journal of Plasticity, vol. 20, pages 937–963, 2004.
- [Bui 69] H.D. Bui. *Etude de l'évolution de la frontière du domaine élastique avec l'écrouissage et relations de comportement élasto-plastique des métaux cubiques*. Thèse d'état, Faculté des Sciences de l'Université de Paris, 1969.
- [Bullough 75a] R. Bullough & M. R. Hayns. *Irradiation-creep due to point defect absorption*. Journal of Nuclear Materials, vol. 57, pages 348–352, 1975.
- [Bullough 75b] R. Bullough & J. R. Willis. *The stress-induced point defect-dislocation interaction and its relevance to irradiation creep*. Philosophical Magazine, vol. 31, pages 855–861, 1975.
- [Bullough 80] R. Bullough & M. H. Wood. *Mechanisms of radiation induced creep and growth*. Journal of Nuclear Materials, vol. 90, pages 1–21, 1980.
- [Caillard 03] D. Caillard & J.L. Martin. Thermally activated mechanisms in crystal plasticity. Elsevier, Pergamon Materials Series, 2003.
- [Cailletaud 87] G. Cailletaud. *Une approche micromécanique phénoménologique du comportement inélastique des métaux*. Thèse d'état, Université Paris VI, 1987.
- [Cailletaud 94] G. Cailletaud & P. Pilvin. *Utilisation de modèles polycristallins pour le calcul par éléments finis*. Revue Européenne des Eléments Finis, vol. 3, pages 515–541, 1994.

## Références bibliographiques

---

- [Cailletaud 95] G. Cailletaud & K. Sai. *Study of plastic/viscoplastic models with various inelastic mechanisms*. International Journal of Plasticity, vol. 11, pages 991–1005, 1995.
- [Chaboche 85] J. Lemaitre & J-L. Chaboche. *Mécanique des matériaux solides*. Dunod, Paris, 1985.
- [Charquet 98] D. Charquet, J. Senevat & J. P. Mardon. *Influence of sulfur content on the thermal creep of zirconium alloy tubes at 400°C*. Journal of Nuclear Materials, vol. 255, pages 78–82, 1998.
- [Christien 05] F. Christien & A. Barbu. *Effect of self-interstitial diffusion anisotropy in electron-irradiated zirconium : A cluster dynamics modeling*. Journal of Nuclear Materials, vol. 346, pages 272–281, 2005.
- [Cottrell 48] A.H. Cottrell. *Report on the strength of solids*. The Physical Society, London, 1948.
- [Crépin 95] J. Crépin. *Etude des mécanismes de déformation et d'endommagement du zirconium grade 702 traité bêta*. Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique, 1995.
- [de Carlan 96] Y. de Carlan. *Contribution à l'étude des phénomènes d'accélération de la croissance en réacteur des alliages de zirconium - Influence du fer sur la formation des boucles de dislocation de type c*. Thèse de doctorat, INP Grenoble, 1996.
- [Debye 42] P. Debye. *Reaction rate in ionic solutions*. Transactions Electrochemical Society, vol. 82, pages 265–272, 1942.
- [Delobelle 90] P. Delobelle. *Synthèse sur le comportement et la modélisation viscoplastique d'un acier inoxydable 17-12 SPH aux températures intermédiaires  $20^{\circ}\text{C} \leq T \leq 700^{\circ}\text{C}$* . Revue de Physique Appliquée, vol. 25, page 977, 1990.
- [Delobelle 96] P. Delobelle, P. Robinet, P. Geyer & P. Bouffieux. *A model to describe the anisotropic viscoplastic behaviour of Zircaloy-4 tubes*. Journal of Nuclear Materials, vol. 238, pages 135–162, 1996.
- [Delobelle 02] P. Delobelle, F. Richard, L. Hirsinger & D. Perreux. *Modélisation et comportement viscoplastique du zircaloy-4 sous flux*. [lma.univ-fcomte.fr/images/A1\\_%20Zircaloy.pdf](http://lma.univ-fcomte.fr/images/A1_%20Zircaloy.pdf), 2002.
- [Diard 05] O. Diard, S. Leclercq, G. Rousselier & G. Cailletaud. *Evaluation of finite element based analysis of 3D multicrystalline aggregates plasticity : Application to crystal plasticity model identification and the study of stress and strain fields near grain boundaries*. International Journal of Plasticity, vol. 21, pages 691–722, 2005.
- [Dorn 64] J.E. Dorn & S. Rajnak. *Nucleation of kink pairs and the Peierls' mechanism of plastic deformation*. Transactions of the metallurgical society of AIME, vol. 230, page 1052, 1964.

- [Duffin 72] W.J. Duffin & F.A. Nichols. *The effect of irradiation on diffusion controlled creep processes*. Journal of Nuclear Materials, vol. 45, pages 302–316, 1972.
- [Dunlop 05] J. Dunlop. *Approche par variable interne du fluage et recristallisation des alliages en zirconium*. Thèse de doctorat, INPG, 2005.
- [Einstein 05] A. Einstein. *Zur Elektrodynamik bewegter Körper - On the electrodynamics of moving bodies*. Annalen der Physik, vol. 17, page 891, 1905.
- [Eshelby 57] J.D. Eshelby. *The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problem*. Proceedings of the Royal Society of London, vol. 241, pages 376–396, 1957.
- [Ewen 75] S.R. Mac Ewen, V. Fidleris & C. H. Woo. *Verification of a model for in-reactor creep transients in zirconium*. Philosophical Magazine, vol. 31, pages 1149–1157, 1975.
- [Fandeur 01] O. Fandeur. *Etude expérimentale et modélisation mécanique de la corrosion sous contrainte des gaines en Zircaloy-4*. Thèse de doctorat, Ecole Centrale Paris, 2001.
- [Feaugas 97] X. Feaugas, P. Pilvin & M. Clavel. *Cyclic deformation behaviour of an  $\alpha/\beta$  titanium alloy-II. Internal stresses and micromechanical modelling*. Acta Materialia, vol. 45, pages 2703–2714, 1997.
- [Feaugas 09] X. Feaugas & P. Pilvin. *A Polycrystalline Approach to the Cyclic Behaviour of f.c.c. Alloys - Intra-Granular Heterogeneity*. Advanced Engineering Materials, vol. 11, pages 703–709, 2009.
- [Ferrer 00] F. Ferrer. *Etude des mécanismes de déformation du zirconium entre 25°C et 400°C. Influence d'une faible teneur en soufre*. Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique, 2000.
- [Ferrer 01] F. Ferrer, A. Barbu, T. Bretheau, J. Crépin, F. Willaime & D. Charquet. *Plasticity of zirconium at intermediate temperatures. Effect of a small amount of sulfur*. ASTM, 2001.
- [Fidleris 88] V. Fidleris. *The irradiation creep and growth phenomena*. Journal of Nuclear Materials, vol. 159, pages 22–42, 1988.
- [Foreman 68] A.J.E. Foreman. *Junction reaction hardening by dislocation loops*. Philosophical magazine, vol. 17, page 353, 1968.
- [Forest 95] S. Forest & P. Pilvin. *Modelling the cyclic behaviour of two-phase single crystal nickel-base superalloys*. pages 51–58. Ed. A. Pineau and A. Zaoui, Kluwer Academic Publishers, 1995. IU-TAM Symposium on Micromechanics of Plasticity and Damage of Multiphase Materials.
- [Forest 01] S. Forest & M. Fivel. *Modèles discrets et continus de la plasticité des métaux : du monocristal au polycristal*. J. Ayache and J.-P.

## Références bibliographiques

---

- Mornioli -Microscopie des défauts cristallins - Ecole thématique CNRS Oléron, 2001.
- [Forest 06] S. Forest. *Milieux continus généralisés et matériaux hétérogènes*. Transvalor - Presses des Mines, 2006.
- [Frénois 01] S. Frénois, E. Munier, X. Feaugas & P. Pilvin. *A polycrystalline model for stress-strain behaviour of tantalum at 300 K*. Journal de physique IV, vol. 85, page 346, 2001.
- [Garner 88] F. A. Garner & D. S. Gelles. *Irradiation creep mechanisms : An experimental perspective*. Journal of Nuclear Materials, vol. 159, pages 286–309, 1988.
- [Garner 07] G.L. Garner, J.P. Mardon & I.Q. Mensah. *Performance of alloy M5<sup>®</sup> cladding and structure at burnups beyond the current licensing limit in U.S. reactors*. Revue générale nucléaire, vol. 6, pages 80–83, 2007.
- [Gaudin 02] C. Gaudin. *Mécanismes de déformation associés au rochet cyclique*. Thèse de doctorat, Université de Technologie de Compiègne, 2002.
- [Gérard 08] C. Gérard. *Mesures de champs et identification de modèles de plasticité cristalline*. Thèse de doctorat, Université Paris XIII, 2008.
- [Geuffrard 06] M. Geuffrard. *Modélisation du comportement thermo-élasto-viscopastique d'un alliage de zirconium*. Rapport de stage de DEA, LG2M, Université de Bretagne-Sud, 2006.
- [Geyer 99a] P. Geyer. *Comportement élasto-viscoplastique de tubes en Zircaloy-4 : Approche expérimentale et modélisation micromécanique*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1999.
- [Geyer 99b] P. Geyer, X. Feaugas & P. Pilvin. *Modelling of the anisotropic viscoplastic behavior of fully annealed Zircaloy-4 tubes by a polycrystalline approach - Plasticity99*. pages 133–136, Cancun, Mexico, 1999.
- [Gilbon 00] D. Gilbon, A. Soniak, S. Doriot & J.P. Mardon. Irradiation creep and growth behavior, and microstructural evolution of advanced zr-base alloys, page 943. G.P. Sabol - Zirconium in the Nuclear Industry : Twelfth International Symposium ASTM STP 1354, 2000.
- [Gittus 72] J.H. Gittus. *Theory of dislocation-creep due to the Frenkel defects or interstitial produced by bombardment with energetic particles*. Philosophical magazine, vol. 25, pages 345–354, 1972.
- [Gittus 73] J.H. Gittus. *Theory of dislocation-creep for a material subjected to bombardment by energetic particles*. Philosophical magazine, vol. 28, pages 261–270, 1973.



- [Gloaguen 02] D. Gloaguen, M. François, R. Guillén & J. Royer. *Evolution of internal stresses in rolled Zr702 $\alpha$* . Acta Materialia, vol. 50, pages 871–880, 2002.
- [Gloaguen 07] D. Gloaguen, T. Berchi, E. Girard & R. Guillén. *Measurement and prediction of residual stresses and crystallographic texture development in rolled Zircaloy-4 plates : X-ray diffraction and the self-consistent model*. Acta Materialia, vol. 55, pages 4369–4379, 2007.
- [Gosele 76] U. Gosele & A. Seeger. *Theory of bimolecular reaction rates limited by anisotropic diffusion*. Philosophical Magazine, vol. 34, pages 177–193, 1976.
- [Graff 06] S. Graff. *Viscoplastic behavior of zirconium alloys in the temperature range 20°C-400°C :characterization and modelling of strain ageing phenomena*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2006.
- [Griffiths 93] M. Griffiths. *Evolution of microstructure in hcp metals during irradiation*. Journal of Nuclear Materials, vol. 205, pages 225–241, 1993.
- [Griffiths 96] M. Griffiths, J.F. Mecke & J.E. Winegar. Evolution of microstructure in zirconium alloys during irradiation, pages 580–602. E.R. Bradley, G.P. Sabol - Zirconium in the Nuclear Industry : Eleventh International Symposium ASTM STP 1295, 1996.
- [Groh 09] S. Groh, E.B. Marin, M.F. Horstemeyer & H.M. Zbib. *Multiscale modeling of the plasticity in an aluminum single crystal*. International Journal of Plasticity, vol. 25, pages 1456–1473, 2009.
- [Grosjean 09] C. Grosjean. *Etude de l'anisotropie de comportement en fluage thermique de tubes gaine et de tubes guide en alliages de Zirconium. Développements expérimentaux et résultats*. Thèse de doctorat, INP Toulouse, 2009.
- [Heald 74] P.T. Heald & M.V. Speight. *Steady-state irradiation creep*. Philosophical magazine, vol. 29, pages 1075–1080, 1974.
- [Heald 76] P.T. Heald & R. Bullough. Vacancies '76, R.E. Smallman and J.E. Harris (The Metals Society, London 1977). 1976.
- [Hellio 88] C. Hellio, C.H. de Novion & L. Boulanger. *Influence of alloying elements on the dislocation loops created by Zr<sup>+</sup> ion or by electron irradiation in  $\alpha$ -zirconium*. Journal of Nuclear Materials, vol. 159, pages 368–378, 1988.
- [Hill 50] R. Hill. *The mathematical theory of plasticity*. Oxford, Clarendon Press, 1950.
- [Hill 65] R. Hill. *Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 13, pages 89–101, 1965.

- [Holt 04] R.A. Holt & A.R. Causey. *Volume conservation during irradiation growth of Zr-2.5Nb*. Journal of Nuclear Materials, vol. 335, pages 529–533, 2004.
- [Holt 08] R.A. Holt. *In-reactor deformation of cold-worked Zr-2.5Nb pressure tubes*. Journal of Nuclear Materials, vol. 372, pages 182–214, 2008.
- [Hosford 72] W.F. Hosford. *A generalised isotropic yield criterion*. Journal of Applied Mechanics, vol. 39, pages 607–609, 1972.
- [Hugot 99] J.P. Hugot & P. Yvon. *Déformation sous irradiation - synthèse*. Note technique SRMA 99-2310, CEA, 1999.
- [Jackson 83] P.J. Jackson. *The role of cross-slip in the plastic deformation of crystals*. Materials Science and Engineering, vol. 57, pages 39–47, 1983.
- [Jostsons 77] A. Jostsons, P. M. Kelly & R. G. Blake. *The nature of dislocation loops in neutron irradiated zirconium*. Journal of Nuclear Materials, vol. 66, pages 236–256, 1977.
- [Jung 10] Y. Jung, Y. Seol, B. Choi, J. Park & Y. Jeong. *Effect of Cr on the creep properties of zirconium alloys*. Journal of Nuclear Materials, vol. 396, pages 303–306, 2010.
- [Kapinos 91] V. G. Kapinos, Yu. N. Osetskii & P. A. Platonov. *Simulation of defect cascade collapse in hcp zirconium*. Journal of Nuclear Materials, vol. 184, pages 127–143, 1991.
- [Karafillis 93] A.P. Karafillis & M.C. Boyce. *A general anisotropic yield criterion using bounds and a transformation weighting tensor*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 41, pages 1859–1886, 1993.
- [Kearns 65] J.J. Kearns. *Thermal expansion and preferred orientation in zircaloy*. Report WAPD-TM-472, Bettis Atomic Power Laboratory, 1965.
- [Kelly 73] P.M. Kelly & P.D. Smith. *Strain-ageing in zirconium-oxygen alloys*. Journal of Nuclear Materials, vol. 46, pages 23–34, 1973.
- [Kerner 56] E.H. Kerner. *The elastic and thermo-elastic properties of composite media*. Proceedings of the Physical Society, vol. 69, pages 808–813, 1956.
- [Knorr 75] D. Knorr & M. Notis. *Deformation mechanism mapping of  $\alpha$ -Zr and zircaloy-2*. Journal of Nuclear Materials, vol. 56, pages 18–24, 1975.
- [Kondo 10] D. Kondo. Cours de thermoélasticité - poroélasticité. Ecole d'été Changement d'échelle en mécanique des matériaux - Briançon, 2010.

- [Lebensohn 10] R.A. Lebensohn, C.S. Hartley, C.N. Tomé & O. Castelnau. *Modelling the mechanical response of polycrystals deforming by climb and glide*. Philosophical Magazine, vol. 90, pages 567–583, 2010.
- [Lee 07] M. Lee, J. Kim, B. Choi & Y. Jeong. *Mechanical properties and dynamic strain aging behavior of Zr-1.5Nb-0.4Sn-0.2Fe alloy*. Journal of Alloys and Compounds, vol. 428, pages 99–105, 2007.
- [Lemaignan 04] C. Lemaignan. *Science des matériaux pour le nucléaire*. EDP Sciences, Paris, 2004.
- [Lin 57] T.H. Lin. *Analysis of elastic and plastic strains of face centered cubic crystal*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 5, pages 143–149, 1957.
- [Liu 10] Y. Liu, J. Zhou & X. Ling. *Impact of grain size distribution on the multiscale mechanical behavior of nanocrystalline materials*. Materials Science and Engineering, vol. 527, pages 1719–1729, 2010.
- [Luton 72] M. Luton & J. Jonas. *Solute strengthening at high temperatures in zirconium-tin alloys*. Canadian Metallurgical Quarterly, vol. 1, pages 79–90, 1972.
- [Macewen 84] S.R. Macewen, R.H. Zee, R.C. Birtcher & C. Abkomeit. *Point defect production and annihilation in neutron-irradiated zirconium*. Journal of Nuclear Materials, vol. 123, pages 1036–1040, 1984.
- [Mansur 79] L.K. Mansur. *Irradiation creep by climb-enabled glide of dislocations resulting from preferred absorption of point defects*. Philosophical magazine, vol. 39, pages 497–506, 1979.
- [Matthews 88] J.R. Matthews & M.W. Finnis. *Irradiation creep models : an overview*. Journal of Nuclear Materials, vol. 159, pages 257–285, 1988.
- [Mukherjee 08] P. Mukherjee, P. Barat, S.K. Bandyopadhyay, N. Gayathri & M. Bhattacharya. *Role of Accelerators in Studying Radiation Damage in Nuclear Structural Materials - Variable Energy Cyclotron Centre Kolkata*. In [www.veccal.ernet.in](http://www.veccal.ernet.in), 2008.
- [Mura 87] T. Mura. *Mechanics of elastic and inelastic solids, micromechanics of defects in solids*. Second, Revised edition. Springer, 1987.
- [Norgett 75] M. J. Norgett, M. T. Robinson & I. M. Torrens. *A proposed method of calculating displacement dose rates*. Nuclear Engineering and Design, vol. 33, pages 50–54, 1975.
- [Norris 99] S.D Norris & I. Wilson. *Application of 3D numerical modelling for thermal profile optimization on the Gleeble thermomechanical simulator*. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, vol. 7, pages 297–309, 1999.

- [Northwood 77] D.O. Northwood. *Irradiation damage in zirconium and its alloys*. Atomic energy Review, pages 547–610, 1977.
- [Northwood 79] D. O. Northwood, R. W Gilbert, L. E. Bahen, P. M. Kelly, R. G. Blake, A. Jostsons, P. K. Madden, D. Faulkner, W. Bell & R. B. Adamson. *Characterization of neutron irradiation damage in zirconium alloys - an international round-robin experiment*. Journal of Nuclear Materials, vol. 79, pages 379–394, 1979.
- [Onimus 03] F. Onimus. *Approche expérimentale et modélisation micromécanique du comportement des alliages de zirconium irradiés*. Thèse de doctorat, Ecole Centrale Paris, 2003.
- [Onimus 04] F. Onimus, I. Monnet, J. L. Béchade, C. Prioul & P. Pilvin. *A statistical TEM investigation of dislocation channeling mechanism in neutron irradiated zirconium alloys*. Journal of Nuclear Materials, vol. 328, pages 165–179, 2004.
- [Onimus 06] F. Onimus, J.L. Béchade, C. Duguay, D. Gilbon & P. Pilvin. *Investigation of neutron radiation effects on the mechanical behavior of recrystallized zirconium alloys*. Journal of Nuclear Materials, vol. 358, pages 176–189, 2006.
- [Onsager 38] L. Onsager. *Initial Recombination of Ions*. Physical Review, vol. 54, pages 554–557, 1938.
- [Pachauri 07] R. K. Pachauri. *Climate change 2007 - synthesis report*. Intergovernmental Panel on Climate Change, 2007. Press presentation.
- [Paola 10] F. Di Paola. *Modélisation multi-échelles du comportement thermo-mécanique de composites à particules sphériques*. Thèse de doctorat, Ecole Centrale Paris, 2010.
- [Phythian 88] W. J. Phythian. *Displacement collision cascade damage in hcp metals*. Journal of Nuclear Materials, vol. 159, pages 219–224, 1988.
- [Piercy 68] G.R. Piercy. *Mechanism for the in-reactor creep of zirconium alloys*. Journal of Nuclear Materials, vol. 26, pages 18–50, 1968.
- [Pilvin 83] P. Pilvin. *Modélisation du comportement des assemblages de structures à barres*. Thèse de 3ème cycle, Université Paris VI, 1983.
- [Pilvin 90] P. Pilvin. *Approches multiéchelles pour la prévision du comportement anélastique des métaux*. Thèse de doctorat, Université Paris VI, 1990.
- [Pilvin 97] P. Pilvin & P. Geyer. *Modelling of Uniaxial and Multiaxial Ratchetting of SS316 SPH by a Polycrystalline Approach*. SMIRT, 1997.
- [Ponte-Castañeda 92] P. Ponte-Castañeda. *New variational principles in plasticity and their application to composite materials*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 40, pages 1757–1788, 1992.

- [Priser 09] M. Priser, J-M. Cloué, D. Poquillon, X. Feaugas & P. Pilvin. *A mixed yield surface for modelling the anisotropic mechanical behavior of Zirconium alloys*. SMIRT, 2009.
- [Priser 11] M. Priser, M. Rautenberg, J-M. Cloué, P. Pilvin, X. Feaugas & D. Poquillon. *Multiscale analysis of visco-plastic behaviour of recrystallized zircaloy-4 at 400°C*. Accepted for publication in Journal of ASTM International, vol. 8, 2011.
- [Rautenberg 09] M. Rautenberg. *Etude macro et micro du comportement d'alliages de zirconium sollicités en fluage*. Rapport de stage de Master, LEMMA La Rochelle, 2009.
- [Ribis 07] J. Ribis. *Approche expérimentale et modélisation micromécanique du comportement en fluage des alliages de zirconium irradiés*. Thèse de doctorat, INP Grenoble, 2007.
- [Rice 71] J.R. Rice. *Inelastic constitutive relations for solids : An internal-variable theory and its application to metal plasticity*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 19, pages 433–455, 1971.
- [Roberts 56] A.C. Roberts & A.H. Cottrell. *Creep of alpha uranium during irradiation with neutrons*. Philosophical magazine, vol. 1, pages 711–717, 1956.
- [Robinet 95] P. Robinet. *Etude expérimentale et modélisation du comportement viscoplastique anisotrope du Zircaloy-4 dans deux états métallurgiques*. Thèse de doctorat, Université de Franche-Comté, 1995.
- [Ruer 76] D. Ruer. *Méthode vectorielle d'analyse de la texture*. Thèse d'état, Université de Metz, 1976.
- [Russel 54] R.B Russel. *Coefficients of thermal expansion for zirconium*. Transactions American Institute of Mining and Metallurgical, vol. 145, pages 1045–1052, 1954.
- [Sachs 28] G. Sachs. *Zur ableitung einer Fließbedingung*. Z. Verein Deut. Ing., vol. 72, page 734, 1928.
- [Sai 93] K. Sai. *Modèles à grand nombre de variables internes et méthodes numériques associées*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1993.
- [Sai 06] K. Sai, G. Cailletaud & S. Forest. *Micro-mechanical modeling of the inelastic behavior of directionally solidified materials*. Mechanics of Materials, vol. 38, pages 203–217, 2006.
- [Sai 07] K. Sai & G. Cailletaud. *Multi-mechanism models for the description of ratchetting : Effect of the scale transition rule and of the coupling between hardening variables*. International Journal of Plasticity, vol. 23, pages 1589–1617, 2007.

## Références bibliographiques

---

- [Saintoyant 09] L. Saintoyant. *Couplage fluage-recristallisation dans les alliages de zirconium*. Thèse de doctorat, INPG, 2009.
- [Savino 80] E. J. Savino & C. E. Laciana. *Radiation induced creep and growth of zirconium alloys*. Journal of Nuclear Materials, vol. 90, pages 89–107, 1980.
- [Schäffler 97] I. Schäffler. *Modélisation du comportement élasto-visco-plastique anisotrope des tubes de gaine du crayon combustible entre zéro et quatre cycles de fonctionnement en réacteur à eau pressurisée*. Thèse de doctorat, Université de Franche-Comté, 1997.
- [Schwarz 75] R.B. Schwarz & A.V. Granato. *Measurement of the Force-Distance Profile for the Interaction between a dislocation and a point defect*. Physical Review, vol. 34, pages 1174–1177, 1975.
- [Serres 07] A. Serres, L. Fournier & G. Was. *Radiation induced microstructure, dislocation channelling and iodine-induced stress corrosion cracking in proton-irradiated zircaloy-4*. Michigan Ion Beam Laboratory : Annual research report [www.engin.umich.edu/center/mibl/2006/MIBL2007.pdf](http://www.engin.umich.edu/center/mibl/2006/MIBL2007.pdf), 2007.
- [Shishov 96] V.N. Shishov, A.V. Nikulina, V.A. Markelov, M.M. Peregud, A.V. Kozlov, S.A. Averin, S.A. Kolbenkov & A.E. Novoselov. *Influence of neutron irradiation on dislocation structure and phase composition of Zr-base alloys*. Zirconium in the nuclear industry : Eleventh International Symposium ASTM STP 1295, vol. 92, pages 603–622, 1996.
- [Simeone 97] D. Simeone, O. Hablot, V. Micalet, P. Bellon & Y. Serruys. *Contribution of recoil atoms to irradiation damage in absorber materials*. Journal of Nuclear Materials, vol. 246, pages 206–214, 1997.
- [Sizmann 78] R. Sizmann. *The effect of radiation upon diffusion in metals*. Journal of Nuclear Materials, vol. 69-70, pages 386–412, 1978.
- [Smoluchowski 17] M. Smoluchowski. *Vers une théorie mathématique de la cinétique de coagulation des solutions colloïdales*. Journal of Physical Chemistry, vol. 92, pages 129–168, 1917.
- [Soniak 92] A. Soniak. *Croissance et fluage sous flux des tubes de gaine X1 1ère phase. Irradiations ZS 07, ZS 08, ZS 09*. Note technique SRMA 92-1954, CEA, 1992.
- [Taylor 38] G.I. Taylor. *Plastic Strain in Metals*. Journal Institute of Metals, vol. 62, pages 307–324, 1938.
- [Thorpe 78a] W.R. Thorpe & I.O. Smith. *Creep properties of Zr-1wt%Nb alloy*. Journal of Nuclear Materials, vol. 75, pages 209–219, 1978.
- [Thorpe 78b] W.R. Thorpe & I.O. Smith. *Stress drop experiments during creep of Zr-1wt%Nb alloy*. Materials Science and Engineering, vol. 36, pages 145–154, 1978.

- [Thorpe 78c] W.R. Thorpe & I.O. Smith. *Tensile properties of Zr-1wt%Nb alloy*. Journal of Nuclear Materials, vol. 78, pages 49–57, 1978.
- [Thorpe 79] W.R. Thorpe & I.O. Smith. *Static strain ageing of Zr-1wt%Nb Alloy*. Journal of Nuclear Materials, vol. 80, pages 35–42, 1979.
- [Tinti 83] F. Tinti. *Uniaxial in-reactor creep of Zircaloy-2 : Stress, flux, and temperature dependence*. Nuclear Technology, vol. 60, pages 104–113, 1983.
- [Vadon 81] A. Vadon. *Généralisation et optimisation de la méthode vectorielle d'analyse de la texture*. Thèse d'état, Université de Metz, 1981.
- [Vogel 96] C. Vogel. *Modélisation du comportement et de l'endommagement en fatigue-fluage du zirconium à 200°C*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1996.
- [Waite 57] T. R. Waite. *Theoretical Treatment of the Kinetics of Diffusion-Limited Reactions*. Physical Review, vol. 107, pages 463–470, 1957.
- [Weng 81] G.J. Weng. *Self-Consistent Determination of Time-Dependent Behavior of Metals*. Journal of Applied Mechanics, vol. 48, page 41, 1981.
- [Wolfer 75] W.G. Wolfer & M. Ashkin. *Stress-induced diffusion of point defects to spherical sinks*. Journal of Applied Physics, vol. 46, pages 547–557, 1975.
- [Woo 79] C. H. Woo. *Effects of an anisotropic dislocation structure on irradiation creep due to stress induced preferred absorption of point defects*. Journal of Nuclear Materials, vol. 80, pages 132–143, 1979.
- [Woo 84] C.H. Woo. *Irradiation creep due to elastodiffusion*. Journal of Nuclear Materials, vol. 120, pages 55–64, 1984.
- [Woo 85] C.H. Woo. *Polycrystalline effects on irradiation creep and growth in textured zirconium*. Journal of Nuclear Materials, vol. 131, pages 105–117, 1985.
- [Woo 88] C.H. Woo. *Theory of irradiation deformation in non-cubic metals : Effects of anisotropic diffusion*. Journal of Nuclear Materials, vol. 159, pages 237–256, 1988.
- [Woo 93] C.H. Woo, F.A. Garner & R.A. Holt. *Irradiation creep due to SIPA under cascade damage conditions*. Effects of Radiation on Materials : 16th International Symposium ASTM STP 1175, 1993.
- [Woo 00] C.H. Woo & C. B. So. *The effect of stress on point-defect diffusion in hcp metals and irradiation creep*. Philosophical Magazine, vol. 80, pages 1299–1318, 2000.

## Références bibliographiques

---

- [Wooding 98] S. J. Wooding, L. M. Howe, F. Gao, A. F. Calder & D. J. Bacon. *A molecular dynamics study of high-energy displacement cascades in  $\alpha$ -zirconium*. Journal of Nuclear Materials, vol. 254, pages 191–204, 1998.
- [Yi 92] J.K. Yi, H.B. Park, G.S. Park & B.W. Lee. *Yielding and dynamic strain aging behavior of Zircaloy-4*. Journal of Nuclear Materials, vol. 189, pages 353–361, 1992.
- [Zaoui 72] A. Zaoui. *Effets de la désorientation des grains sur le comportement viscoplastique des polycristaux c.f.c.* International Journal of Solids and Structures, vol. 8, pages 1089–1101, 1972.
- [Zaoui 90] A. Zaoui. *Comportement global des polycristaux : passage du monocristal au polycristal*. Ecole d'été Physique et mécanique de la mise en forme des métaux - Oléron, 1990.





## Résumé

Les alliages de Zirconium sont utilisés dans l'industrie électro-nucléaire en tant que matériau de gainage du combustible. Les tubes assurent, entre autres, la fonction de confinement des produits de fission et d'échangeur thermique entre le combustible et le fluide caloporteur du circuit primaire. En service, les alliages sont soumis à des sollicitations thermomécaniques et neutroniques très sévères. La tenue mécanique des crayons combustibles à ces sollicitations constitue un point clé dans le bon fonctionnement des réacteurs nucléaires.

Au cours de cette étude, des investigations en Microscopie Electronique en Transmission ont été entreprises par des collaborateurs afin de quantifier les mécanismes de plasticité actifs pour les domaines de contrainte et de température visités. Il ressort de cette étude que le mécanisme de glissement prismatique des dislocations vis reste majoritaire et qu'il est fréquemment accompagné d'un mécanisme de glissement dévié sur les plans pyramidaux. Ces observations expérimentales ont été intégrées dans une modélisation multi-échelle et permettent une description plus fine des phénomènes. Une campagne de caractérisation du comportement en fluage multiaxial à 400°C de l'alliage Zircaloy-4 recristallisé est exploitée dans ce travail et une analyse micromécanique du comportement est proposée. Le comportement Elasto-Visco-Plastique (EVP) est également caractérisé à travers d'essais de relaxation entre 280°C et 430°C mettant en évidence des manifestations macroscopiques du vieillissement dynamique.

Parallèlement à ce travail, des calculs éléments finis sur agrégats polycristallins ont été entrepris et une stratégie d'estimation statistique des champs mécaniques moyens intraphases a été proposée. Cet estimateur permet de retrouver, pour un nombre suffisant de réalisations statistiques, la solution analytique fournie par le modèle autocohérent dans le cadre d'un comportement élastique anisotrope avec une précision satisfaisante. La démarche a donc été appliquée à un milieu EVP et il semble que le modèle en  $\beta$  permette de décrire convenablement les observations numériques. Toutefois, l'écoulement élastoviscoplastique des phases cristallographiques présentant un comportement quasi-élastique reste difficile à décrire.

L'objectif de la thèse est de développer des modélisations du comportement EVP d'alliages de zirconium en fondant notre approche sur une description physique des phénomènes mis en jeu. L'idée est de parvenir à décrire l'anisotropie, très prononcée, du comportement mécanique des alliages de zirconium. La prise en compte de la texture cristallographique et des mécanismes de déformation actifs au travers d'un modèle polycristallin permet de décrire avec une précision satisfaisante le comportement en fluage multiaxial à 400°C. Dans une démarche d'implémentation industrielle, les modèles ainsi élaborés sont simplifiés et un critère d'écoulement mixte est proposé afin de décrire les surfaces de charge simulées par le modèle polycristallin. Une démarche de modélisation phénoménologique multimécanisme est finalement appliquée au comportement à 20°C et à 400°C du Zircaloy-4 recristallisé.

Enfin, les effets de l'irradiation sur le comportement mécanique des alliages de zirconium sont étudiés au travers d'une revue bibliographique et une démarche de modélisation est proposée dans le but de prendre en compte les mécanismes responsables de la déformation sous irradiation des alliages de zirconium.

## Abstract

Zirconium alloys are used in the nuclear industry as fuel cladding tubes in order to prevent radionuclide leaks into primary loop. They are also used to ensure an efficient heat transfer between nuclear fuel and primary water. Under operating conditions, these alloys are subjected to intense thermal-mechanical and neutronic solicitations. The mechanical wear of fuel rods is a key element in nuclear reactor safety.

During this work, TEM investigations have been carried out by coworkers in order to quantify driving plasticity mechanisms in investigated stress and temperature range. The main result of this study is that the prismatic glide of screw dislocations remains the main plasticity mechanism. It is frequently associated with a cross slip mechanism on pyramidal planes. These experimental observations have been implemented into a multiscale approach, thus providing a better description of the phenomenon. The results of a characterization campaign of the multiaxial creep behavior at 400°C of recrystallised Zircaloy-4 are used in this work and a micromechanical interpretation is proposed. The Elasto-Visco-Plastic (EVP) behavior is also characterized with relaxation tests between 280°C and 430°C. Analysis of experimental results indicates macroscopic effects of dynamic strain ageing.

At the same time, Finite Element computations on polycrystalline aggregates were undertaken and a procedure for the statistical estimation of intraphase mean mechanical fields is proposed. For a sufficient number of statistical realizations, it is shown that this estimator allows the precise determination of the analytical solution provided by the self consistent model within the framework of anisotropic elasticity. Thus, this procedure was applied to an EVP medium. It seems that  $\beta$  rule allow a good description of numerical observations. However, EVP flow of quasi-elastic crystallographic phases remains difficult to describe.

The aim of this PhD is to develop models of EVP behavior of zirconium alloys. Our approach is based on a physical description of driving phenomena. The idea is to obtain a good description of a very pronounced mechanical anisotropy of zirconium alloys. The direct implementation of crystallographic texture and plasticity mechanisms in a polycrystalline model allows a good description of multiaxial creep behavior. For industrial purposes, models are simplified and a mixed yield criterion is proposed to describe yield surfaces simulated with the polycrystal approach. This modelling strategy is finally applied to the behavior of recrystallized Zy-4 at 20 and 400°C.

To conclude this work, irradiation effects on mechanical behavior of zirconium alloys have been studied through published works and a micromechanical approach is proposed in order to take into account the micromechanisms responsible for strain under irradiation of zirconium alloys.